АКАДЕМИЯ НАУК СССР
ОРДЕНА ЛЕНИНА СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им.Л.В.КИРЕНСКОГО

ПРЕПРИНТ № 518 Ф

ДИНАМИКА АНИЗОТРОПНОГО ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО ПАРАМАГНЕТИКА В ПРИБЛИЖЕНИИ САМОСОГЛАСОВАННОГО ФЛУКТУИРУЮЩЕГО ПОЛЯ

II. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ ПОЛНОГО МАГНИТНОГО МОМЕНТА СИСТЕМЫ

В.Е.Зобов

Красноярск 1988

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
ОРДЕНА ЛЕНИНА СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им. Л.В.КИРЕНСКОГО

ПРЕПРИНТ № 518 Ф

ДИНАМИКА АНИЗОТРОПНОГО ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО ПАРАМАГНЕТИКА В ПРИБЛИЖЕНИИ САМОСОГЛАСОВАННОГО ФЛУКТУИРУЮЩЕГО ПОЛЯ
II. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ ПОЛНОГО МАГНИТНОГО МОМЕНТА СИСТЕМЫ

В.Е.Зобов

КРАСНОЯРСК 1988

УДК 537.611.43; 539.143.4

Продолжено рассмотрение системы спинов, расположенных в узлах гиперкубической решетки большой размерности $(d \to \infty)$, при высоких температурах $(T \to \infty)$. Выведены и исследованы уравнения для временных корреляционных функций двух магнитных моментов (спинов), расположенных в разных узлах решетки, а также для корреляционных функций, получающихся после перехода с помощью преобразования Фурье от координат узлов к волновым векторам.

ВВЕДЕНИЕ

В предыдущей работе [I] были выведены и исследованы уравнения, описывающие изменение во времени автокорреляционных функций $\Gamma_{\alpha ii}(t)$ трех проекций отдельного магнитного момента (спина), расположенного в некотором узле i гиперкубической решетки размерности d. Решетка образована из одинаковых спинов, взаимодействие между которыми описывается анизотропным гейзенберговским гамильтонианом. Полученные нелинейные интегральные уравнения являются строгими в двойном пределе: большой размерности ($d \to \infty$) и высокой температуры ($T \to \infty$, $Jd/(kT) \to 0$), названном приближением самосогласованного флуктуирующего поля (СФП). В настоящей работе в том же приближении СФП будут выведены и исследованы уравнения для временных корреляционных функций $\Gamma_{\alpha ij}(t)$ (перекрестных корреляционных функций) двух магнитных моментов (спинов), расположенных в разных узлах решетки, а также для корреляционных функций, получающихся после перехода с помощью преобразования Фурье от координат узлов к волновым векторам. Наряду с общими исходными уравнениями рассматриваются различные его варианты как точные, так и приближенные, у функций памяти которых сохранена только определенная часть членов ряда. Большое внимание уделяется случаю сильной магнитной анизотропии, близкой к изинговской. Решения полученных уравнений исследуются в окрестностях ближайших особенностей автокорреляционных функций, для них найдены также несколько первых членов рядов по степеням времени.

В первом разделе настоящего препринта рассматриваются перекрестные корреляционные функции и их образы Фурье, во втором разделе - корреляционные функции полного магнитного момента системы при произвольном волновом векторе, образующиеся при сложении перекрестных и автокорреляционных функций. В заключении обсуждаются вопросы о применимости результатов к реальным парамагнетикам, об изменениях в форме спектра при изменении размерности пространства и радиу-

са взаимодействия. Наконец, в трех Приложениях дан вывод некоторых полезных формул. Отметим, что поскольку материал настоящей, второй части работы тесно связан с ее первой частью [I], то мы далее в тексте, ссылаясь на формулы I-ой части, будем приводить просто их номер, а в нум рации формул последующих двух разделов настоящей части будем использовать следующие по порядку цифры. Мы будем использовать также и список цитированной литературы I-й части, отмечая ссылки на него с помощью штриха у соответствующей цифры.

ПЕРЕКРЕСТНЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ

Вывод общего уравнения

Перекрестная корреляционная функция $\Gamma_{ij}(t)$ (I.5) определяет корреляц в движении двух спинов, расположенных в разных узлах i и j решетки или, на языке локальных полей, определяет вклад поля от спина j в суммарное вращение спина i (и наобо т). В обозначениях [I] можем записать

$$\Gamma_{ij}(t) = \langle \mu_i^\alpha(t)\mu_j^\alpha(0)\rangle / \langle (\mu_i^\alpha)^2\rangle \quad , \qquad (5.1)$$

где $\mu_i^\alpha(t)$ и $\mu_j^\alpha(t)$ – α – компоненты (α -прое ции) i -го и j -го магнитных моментов в момент времени t, вращение которых в локальных магнитных полях $\vec{h}_i(t)$ и $\vec{h}_j(t)$ описывается уравнением (2.I). Проинтегрировав бе части уравнения (2.I), перепишем его в виде

$$\vec{\mu}_i(t) = \vec{\mu}_i(0) + \int_0^t \hat{h}_i(t_1)\vec{\mu}_i(t_1)dt_1 \quad . \qquad (5.2)$$

для проекций локального поля, стоящих в матрице (2.2) оператора $\hat{h}_i(t)$, из (I.2), (I.4) имеем следующее выражение

$$h_i^\alpha(t) = 2\sum_j{}' J_{ij}^\alpha \mu_j^\alpha(t) \quad . \qquad (5.3)$$

Возьмем x -проекцию от (5.2)

$$\mu_i^x(t)=\mu_i^x(0)+\int_0^t[h_i^y(t_1)\mu_i^z(t_1)-h_i^z(t_1)\mu_i^y(t_1)]dt_1 . \tag{5.4}$$

Стоящие в (5.4) проекции поля $h_i^y(t_1)$ и $h_i^z(t_1)$ распишем по формуле (5.3), взяв для $\mu_j^y(t_1)$ и $\mu_j^z(t_1)$ выражения в виде (5.2), и подставим (5.4) в (5.I). Отбросив исчезающие после усреднения по $\mu_i^\alpha(0)$, $\mu_j^\alpha(0)$ и $h^\alpha(t)$ члены, находим:

$$\Gamma_{xij}(t)=\sum_q\Big\langle\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\{2J_{iq}^z h_q^y(t_2)\mu_q^x(t_2)\mu_i^y(t_1)+ 2J_{iq}^y h_q^z(t_2)\mu_q^x(t_2)\mu_i^z(t_1)\}\mu_j^x(0)\Big\rangle/\langle(\mu_i^x)^2\rangle . \tag{5.5}$$

Будем искать $\Gamma_{xij}(t)$ в виде диаграммного ряда. Простейший член получим, взяв в сумме в (5.5) только слагаемое с $q=j$, для которого в сумме типа (5.3) для $h_j^\alpha(t_2)$, в свою очередь, возьмем только вклад в локальное поле от спина i . Таким путем находим

$$\Gamma_{xij}(t)=\mu^2 J_{ij}^z J_{ij}^y\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2[\Gamma_{yii}(t_1-t_2)+\Gamma_{zii}(t_1-t_2)]\Gamma_{xjj}(t_2)+\ldots , \tag{5.6}$$

где $\mu^2=4S(S+1)/3$.

Процедуру выделения этого члена в $\Gamma_{xij}(t)$ можно изобразить следующей схемой (без расстановки проекций)

$$\begin{array}{l}\mu_i(t)\rightarrow\hat{h}_i(t_1)\,\mu_i(t_1)\qquad\mu_i(t_2)J_{ij}J_{ij}\\ \qquad J_{ij}\mu_j(t_1)\rightarrow J_{ij}\hat{h}_j(t_2)\,\mu_j(t_2)\qquad\mu_j(0)\end{array} \tag{5.7}$$

Наконец, используя введенное в [I] диаграммное представление, член (5.6) запишем в виде суммы двух диаграмм:

i i j j + i i j j (5.8)

t t₁ t₂ 0 t t₁ t₂ 0 .

На диаграммах (5.8) на интервале (t_2 , t_1) спин j изображен тонкой линией, а i – жирной (одетой) пунктирной или точечной. Последнее означает, что на этих диаграммах уже учтено вошедшее в (5.5), (5.7) через временную зависимость поля от спина i на спине j взаимодейств спина i с окружающими его спинами $q \neq j$. На диаграммном языке [I] одевание линии указанными взаимодействиями заключается в суммировании всех приводимых диаграмм на данной линии. Поэтому для одевания линии спина j на интервале (t_2 , t_1) взаимодействием с локальным полем от соседей нужно отсуммировать следующие последовательности приводимых диаграмм(см.(2.I4)-(2.I6)):

(5.9)

Для получения диаграммы в (5.9) с $2n$ вершинами на интервале (t_2 , t_1) следует в схеме (5.7) (нижняя строка) $\vec{\mu}_j(t_1)$ заменить не по формуле (5.2), а по следующей формуле:

$$\vec{\mu}_j(t_1) = \vec{\mu}_j(0) + \int_0^{t} \hat{h}_j(t_1)\vec{\mu}_j(0)\,dt_1 + \dots + \int_0^{t} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{2n}} dt_{2n+1}\, \hat{h}_j(t_1)\hat{h}_j(t_2)\dots\hat{h}_j(t_{2n+1})\vec{\mu}_j(t_{2n+1}). \qquad (5.10)$$

Теперь не в поле $h_j^{\alpha}(t_1)$, а в поле $h_j^{\alpha}(t_{2n+1})$ возьмем вклад от спина i для закрывания $\mu_i^{\alpha}(t_1)$ (следует очевидная замена временных переменных, в частности t_{2n+1} обозначим через t_2). Остальные $2n$ операторов поля произведения, стоящего в (5.10) спариваем между собой по обычным правилам для автокорреляционной функции [I].

Обе диаграммы (5.9) с одетыми линиями имеют одинаковые явные выражения, складывая которые, получаем

$$\Gamma_{xij}(t)=2\mu^2 J_{ij}^{z} J_{ij}^{y}\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2\, \Gamma_y(t_1-t_2)\Gamma_z(t_1-t_2)\Gamma_x(t_2)+\ldots \qquad (5.11)$$

Отличные от (5.9) диаграммы мы получим, если возьмем в (5.10) для закрывания $\mu_i^{\alpha}(t_1)$ вклад от спина i не из $\hat{h}_j(t_{2n+1})$, а из какого-нибудь другого оператора $\hat{h}_j(t_m)$. Остальные операторы поля в произведении снова спариваем между собой. Приведем две простейшие диаграммы из этой серии (после суммирования всех приводимых диаграмм):

(5.12)

Диаграммы (5.9) и (5.12) совпадают по внешнему виду (после распрямления линий спина j) с соответствующими диаграммами (2.19) и (2.21) для автокорреляционной функции спина j и отличаются от них только множителем при дуге спина i в явном выражении. Вместо $-\Delta_y^2$ или $-\Delta_z^2$ теперь стоит $J_{ij}^{z} J_{ij}^{y}\mu^2$ без суммирования по i. Подобным свойством обладают и другие диаграммы этой серии.

В диаграммном ряду для $\Gamma_{xij}(t)$ будут и диаграммы, симметричные к (5.12), с дополнительной дугой не для j, а для спина i:

(5.13)

Для получения диаграмм (5.13) и диаграмм с любым числом дополнительных дуг у i она следует в первой строке схемы (5.7) $\vec{\mu}_i(t)$ заменить не по формуле (5.2), а по формуле (5.10) для спина i. В одном из операторов поля $\hat{h}_i(t_m)$ в произведении выделяем вклад от спина j, а оставшиеся операторы спариваем между собой.

Объединяя обе процедуры, мы получим диаграммы с различным числом дополнительных дуг одновременно на линиях спина i и спина j.

Приведем две простейшие диаграммы этого вида:

(5.I4)

Диаграммы (5.I4) и другие диаграммы этого вида не имеют аналогов в диаграммном ряду для автокорреляционной функции.

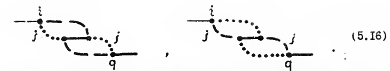
Отметим, что необходимость выделения на диаграммах указанных дополнительных дуг является следствием неперестановочности поворотов, произошедших в результате взаимодействия двух выделенных спинов (i и j), и вращений каждого из них в своем локальном поле.

Новый класс диаграмм для $\Gamma_{xij}(t)$ мы получим, приняв во внимание, что взаимное влияние спинов i и j может быть передано через промежуточные спины. Приводимые диаграммы такого класса легко образуются из рассмотренных выше. Например, если мы домножим в схеме (5.7) во второй строке справа не на $\mu_j^{\alpha}(0)$, а на $\mu_\ell^{\alpha}(0)$, то в (5.6) и в (5.II) под интегралом $\Gamma_{xjj}(t)$ заменится на $\Gamma_{xj\ell}(t_2)$, и мы получим корреляционную функцию $\Gamma_{xi\ell}(t)$, в которой влияние спина i на ℓ передается через спин j.

Неприводимые диаграммы этого класса будем получать по следующей схеме:

$$\begin{array}{l}
\mu_i(t) \longrightarrow \hat{h}_i(t_1)\mu_i(t_1), \quad \mu_i(t_3)\, J_{ij} \\
\qquad J_{ij}\,\mu_j(t_1) \rightarrow J_{ij}\,\hat{h}_j(t_2)\hat{h}_j(t_3)\mu_j(t_3) \qquad \mu_j(t_4)\, J_{qj} \\
\qquad\qquad J_{jq}\,\mu_q(t_2) \longrightarrow J_{jq}\,\hat{h}_q(t_4)\mu_q(t_1) \qquad \mu_q(0)
\end{array} \qquad (5.I5)$$

С помощью схемы (5.I5), одев точно так же как в (5.7) отрезки тонких линий приводимыми диаграммами, получим следующие две диаграммы:



(5.16)

Пользуясь схемой (5.15) как ранее схемой (5.7), мы можем получить диаграммы с различным числом дополнительных дуг на линиях спинов i, j и q. Приведем диаграммы с одной добавочной дугой

(5.17)

Заменив в последней строке схемы (5.15) $J_{jq}\hat{h}_q(t_4)\vec{\mu}_q(t_4)$ на $J_{jq}\hat{h}_q(t_4)\hat{h}_q(t_5)\vec{\mu}_q(t_5)$, мы можем пристроить к (5.15) еще одну ступеньку, т.е. получить следующие две диаграммы

(5.18)

$t \quad t_1 \quad t_2 \; t_3 \, t_4 \; t_5 \quad t_6 \; 0$

и все производные диаграммы от них.

Наращивая ступеньки в схеме (5.15), мы можем получить неприводимые диаграммы с любым числом промежуточных звеньев в цепочке из спинов.

Обозначим сумму всех таких неприводимых диаграмм через $G_{\alpha ij}(t)$. Тогда мы можем записать уравнения для перекрестных корреляционных функций в следующем виде:

$$\frac{d}{dt}\Gamma_{xij}(t)=\int_0^t G_{xij}(t-t_1)\Gamma_x(t_1)\,dt_1 + \qquad (5.19)$$
$$+\sum_{q(\neq i)}\int_0^t G_{xiq}(t-t_1)\Gamma_{xqj}(t_1)\,dt_1-\int_0^t G_x(t-t_1)\Gamma_{xij}(t_1)\,dt_1 .$$

Будем представлять $G_{\alpha ij}(t)$, как $G_\alpha(t)$ ранее в (2.I8), в виде ряда по числу вершин на диаграммах

$$G_{\alpha ij}(t)=\sum_{m=1}^{\infty} G_{\alpha ij}^{(2m)}(t) . \qquad (5.20)$$

В приведенных выше диаграммах части между крайними вершинами дают все диаграммы для членов ряда (5.20) с $m=1$ (5.9), $m=2$ (5.I2), (5.I3) и (5.I6), а для членов с $m=3$ те диаграммы (5.I4), (5.I7), (5.I8), аналогов которым не было в ряду для $G_\alpha(t)$.

Явное выражение $G^{(2)}_{\alpha ij}(t)$ получаем из (5.II). Явные выражения для других диаграмм можно выписать по прежним правилам, сформулированным в [I], с небольшими изменениями, касающимися коэффициентов. В [I] мы писали для каждой дуги множитель $-\Delta_\alpha^2$, образовавшийся после усреднения квадрата локального поля от двух вершин по концам дуги. Теперь такой множитель остается только от двух вершин по концам дополнительных дуг, тогда как каждым двум вершинам основной цепи, соединяющим (сшивающим) две соседние линии спинов, q и ℓ, будет соответствовать множитель

$$J^y_{q\ell} J^z_{q\ell} \mu^2 , \qquad (5.21)$$

причем по индексам промежуточных спинов в цепи проводится суммирование.

В качестве иллюстрации выпишем коэффициенты, стоящие перед произведением автокорреляционных функций в явных выражениях для приведенных выше диаграмм. Для двух диаграмм в (5.I2) это:

$$-\Delta_y^2 J^z_{ij} J^y_{ij} \mu^2 , \quad -\Delta_z^2 J^z_{ij} J^y_{ij} \mu^2 \qquad (5.22)$$

и такие же коэффициенты для двух диаграмм в (5.I3). Обеим диаграммам в (5.I4) соответствует один и тот же коэффициент

$$\Delta_z^2 \Delta_y^2 \mathcal{J}_{ij}^z \mathcal{J}_{ij}^y \mu^2 , \qquad (5.23)$$

а обеим диаграммам в (5.16) –

$$\mu^4 \sum_{j(\neq i)}{}' \mathcal{J}_{ij}^z \mathcal{J}_{ij}^y \mathcal{J}_{jq}^z \mathcal{J}_{jq}^y . \qquad (5.24)$$

Коэффициент (5.24) для двух первых диаграмм в (5.17) домножится на $-\Delta_x^2$, а для двух последних – на $-\Delta_y^2$. Наконец, диаграммам (5.18) будет соответствовать коэффициент

$$\mu^6 \sum_{j,q}{}'' \mathcal{J}_{ij}^z \mathcal{J}_{ij}^y \mathcal{J}_{jq}^z \mathcal{J}_{jq}^y \mathcal{J}_{q\ell}^z \mathcal{J}_{q\ell}^y . \qquad (5.25)$$

Перейдем от координат узлов к векторам обратной решетки $\vec{k}$. В таком представлении коэффициенты приобретают простой вид. Например, вместо (5.22)-(5.25) имеем (в том же порядке следования)

$$-\Delta_y^2 E_{\vec{k}} , \; -\Delta_z^2 E_{\vec{k}} , \; \Delta_z^2 \Delta_y^2 E_{\vec{k}} , \; E_{\vec{k}}^2 , \; E_{\vec{k}}^3 , \qquad (5.26а)$$

где

$$E_{\vec{k}} = \mu^2 \sum_{j(\neq i)}{}' \mathcal{J}_{ij}^z \mathcal{J}_{ij}^y exp\{i(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\vec{k}\} . \qquad (5.26б)$$

Система (5.20) для

$$\Gamma_x'(\vec{k},t) = \sum_{j(\neq i)}{}' \Gamma_{xij}(t) exp\{i(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\vec{k}\} \qquad (5.27)$$

приобретает следующий вид

$$\frac{d}{dt} \Gamma_x'(\vec{k},t) = \int_0^t G_x(\vec{k}, t-t_1) \Gamma_x(t_1) dt_1 +$$
$$+ \int_0^t G_x(\vec{k}, t-t_1) \Gamma_x'(\vec{k}, t_1) dt_1 - \int_0^t G_x(t-t_1) \Gamma_x(\vec{k}, t_1) dt_1 , \qquad (5.28)$$

где

$$G_x(\vec{k},t) = \sum_{j(\neq i)}{}' G_{xij}(t) exp\{i(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\vec{k}\} .$$

Обратим внимание, что при переходе от $\vec{r}_i$ к $\vec{k}$ преобразование коснулось только коэффициентов, тогда как произведение автокорреляционных функций остается прежним.

В настоящем параграфе мы рассматривали корреляционную функцию между спинами, расположенными в различных узлах решетки, поэтому мы вычли в (5.27) и (5.23) вклад, соответствующий автокорреляционной функции, рассмотренный в предыдущей работе [I]. Дополнительный вклад в автокорреляционную функцию возможен от цепочек приводимых или неприводимых диаграмм в (5.I9), оканчивающихся снова на первоначальном узле, например, вида $\sum_j G_{\alpha ij}(t)\Gamma_{\alpha ij}(t)$. Поскольку при таком замыкании происходит потеря одного суммирования по решетке, то этот вклад в Z раз меньше основного и пренебрежим в рассматриваемом пределе.

Приближение "цепей"

В диаграммах для $G_{x}(t)$ был один выделенный спин и локальное поле на нем, тогда как в диаграммах для $G_x(\vec{k},t)$ число выделенных спинов, образующих главную цепь, может быть любым. Эта цепь затем одевается взаимодействиями с локальными полями (дугами, образующими приводимые и неприводимые диаграммы). Возьмем в $G_x(\vec{k},t)$ последовательность диаграмм без дополнительных дуг с различным числом звеньев в главной цепи, одетых приводимыми диаграммами, и разобьем ее на две части $G_x^z(\vec{k},t)$ и $G_x^y(\vec{k},t)$.

$$G_x^x(\vec{k},t) = \ldots + \ldots + \ldots + \ldots \quad (5.29)$$

Во второй и всех последующих диаграммах в (5.29) сотрем линию первого спина и обозначим суммы таких диаграмм, взятых без интегрирования по второму концу стертой линии, через $G_x^z(\vec{k},t,t')$.

$$G_x^z(\vec{k},t,t') = \ldots \quad (5.30)$$

Ряды для $G_x^y(\vec{k},t)$ и $G_x^y(\vec{k},t,t')$ получаются из (5.29) и (5.30) после замены z -линий на y -линии и наоборот y на z .

Для введенных функций из (5.30) получаем диаграммные уравнения:

(5.31)

которые в явной записи имеют следующий вид:

$$G_x^z(\vec{k},t,t') = E_{\vec{k}}^2 \int_{t'}^{t} dt_1\, \Gamma_y(t-t_1)\Gamma_x(t_1-t')\Big[\Gamma_y(t')\Gamma_z(t_1) + \int_0^{t'} dt_1'\, \Gamma_y(t'-t_1')G_x^y(\vec{k},t_1,t_1')\Big],$$

$$G_x^y(\vec{k},t,t') = E_{\vec{k}}^2 \int_{t'}^{t} dt_1\, \Gamma_z(t-t_1)\Gamma_x(t_1-t')\Big[\Gamma_z(t')\Gamma_y(t_1) + \int_0^{t'} dt_1'\, \Gamma_z(t'-t_1')\, G_x^z(\vec{k},t_1,t_1')\Big]. \quad (5.32)$$

Решения системы уравнений (5.32) можно искать в виде ряда по степеням времени:

$$G_x^\alpha(\vec{k},t,t') = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} a_{nm}^\alpha(\vec{k})\, t^n (t')^m \qquad (\alpha = z, y) \quad (5.33)$$

или численно. $G_x^\alpha(\vec{k},t)$ выражается через $G_x^\alpha(\vec{k},t,t')$ по следующей формуле

$$G_x^\alpha(\vec{k},t) = E_{\vec{k}}\Gamma_y(t)\Gamma_z(t) + \int_0^t \Gamma_\alpha(t-t')\, G_x^\alpha(\vec{k},t,t')\, dt'. \quad (5.34)$$

Дальнейшее упрощение может быть получено при рассмотрении

диаграмм (5.29) с неодетыми линиями, т.е. при учете взаимодействий только между спинами основной цепи и отказе от учета взаимодействий с локальными полями. Полагая в этом случае в (5.32) $\Gamma'_\alpha(t) = 1$, получаем одно простое уравнение для $\overline{G}_x(\vec{k},t,t') = \overline{G}_x^z(\vec{k},t,t') = \overline{G}_x^y(\vec{k},t,t')$ (Чертой сверху мы будем выделять введенные ранее функции в рассматриваемом сейчас приближении). Подставив в это уравнение $\overline{G}_x(\vec{k},t,t')$ в виде ряда (5.33), найдем для $\overline{a}_{nm}(\vec{k})$ рекуррентные уравнения

$$\overline{a}_{n+1,m+1}(\vec{k}) = E_{\vec{k}} \frac{\overline{a}_{nm}(\vec{k})}{(n+1)(m+1)}, \quad \overline{a}_{0,m+2}(\vec{k}) = -E_{\vec{k}} \frac{\overline{a}_{nm}(\vec{k})}{(n+1)(m+1)}, \quad (5.35)$$

которые при имеющихся начальных условиях: $\overline{a}_{10}(\vec{k}) = -\overline{a}_{01}(\vec{k}) = E_{\vec{k}}^2$, легко решаются. Таким путем мы находим

$$\overline{G}_x(\vec{k},t,t') = E_{\vec{k}}^2 (t-t') \sum_{n=0}^{\infty} \frac{E_{\vec{k}}^n}{n!(n+1)!} (tt')^n . \quad (5.36)$$

Подставив (5.36) в (5.34)(при $\Gamma'_\alpha(t) = 1$) и просуммировав полученный после интегрирования ряд по степеням времени, находим

$$\overline{G}_x^y(\vec{k},t) = G_x^z(\vec{k},t) + G_x^y(\vec{k},t) = 2E_{\vec{k}}^{-1/2} I_1(2tE_{\vec{k}}^{1/2})/t , \quad (5.37)$$

где $I_1(x)$ – функция Бесселя мнимого аргумента первого порядка. Наконец, подставив (5.37) в уравнение (5.28), в котором в рассматриваемом сейчас частном случае следует отбросить последнее слагаемое правой части, и решив полученное уравнение с помощью преобразования Лапласа, находим

$$\overline{\Gamma}_x'(\vec{k},t) = I_0(2tE_{\vec{k}}^{1/2}) - 1 , \quad (5.38)$$

где $I_0(x)$ – функция Бесселя мнимого аргумента нулевого порядка.

С ростом t (5.38) дает при $E_{\vec{k}} > 0$ возрастание корреляционной функции. Это связано с тем, что мы сейчас учли только передачу намагниченности с одного спина на другой при их взаимодействии в главной цепи и не учли уменьшение намагниченности исходного

спина, отбросив затухание автокорреляционных функций. При $E_{\vec{k}} < 0$ намагниченность при переходе с одного спина на другой меняет знак, и $\Gamma_x'(\vec{k},t)$, согласно (5.38), осциллирует с затуханием.

Найденное для $\Gamma_x'(\vec{k},t)$ приближенное выражение (5.38) позволяет решить задачу, поставленную в работе [2], о распространении динамических корреляций на большие расстояния в пределе малых времен $t \to 0$, поскольку в этом пределе является законным пренебрежение "одеванием" линий главной цепи.

Возьмем d-мерную гиперкубическую решетку с взаимодействием ближайших соседей. Разложив (5.38) в ряд и подставив $E_{\vec{k}}$ из (5.26б), получаем

$$\Gamma_x'(\vec{k},t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\xi \Delta_z^2 t^2)^n}{Z^n n!} \sum_{\Sigma m_\beta = n} \prod_{\beta=1}^{d} \left\{ \sum_{p_\beta=0}^{m_\beta} \frac{\exp[ik_\beta(m_\beta - 2p_\beta)]}{p_\beta!(m_\beta - p_\beta)!} \right\}, \quad (5.39)$$

где $\xi = J^y/J^z$, $Z = 2d$, а в качестве единицы длины взят параметр решетки. Корреляционная функция двух спинов, разделенных расстоянием $\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, равна, согласно (5.27), сумме коэффициентов членов ряда (5.39) перед экспонентой с показателем $i\vec{k}\vec{r}$. В рассматриваемом сейчас случае ($t \to 0$, $|r| \gg 1$) из-за наличия $n! \gg 1$ в знаменателе величина корреляционной функции в точке с координатами ($r_1, r_2, \ldots, r_d$) будет определяться членами в соответствующей сумме с минимальным n при данном $\vec{r}$, т.е. теми, у которых все $p_\beta = 0$, а $m_\beta = r_\beta$ (или $p_\beta = m_\beta$, если $r_\beta = -m_\beta < 0$). Следовательно корреляция распространяется по кратчайшему пути (в общем случае не одному). В частном случае вектора $\vec{r}$, направленного вдоль одной из координатных осей, $n = r_\beta$, и

$$\Gamma_{x r_\beta}'(t) \approx \left(\frac{\xi}{|\xi|}\right)^{r_\beta} \frac{1}{2\pi r_\beta} \exp\left\{-r_\beta \ln\left[\left(\frac{r_\beta}{et}\right)^2 \frac{Z}{|\xi| \Delta_z^2}\right]\right\} . \quad (5.40)$$

(В (5.40)) была использована формула Стирлинга). Наконец, если вернуться к размерному времени, согласно (I.3), (I.4), то

$$\vec{\Gamma}'_{x\Gamma_\beta}(t)\approx\left(\frac{\xi}{|\xi|}\right)^{\Gamma_\beta}\frac{i}{2\pi\Gamma_\beta}\exp\left\{-\Gamma_\beta \ln\left[\left(\frac{\Gamma_\beta}{e}\right)^2\frac{(1+\xi^2)Z}{|\xi|X_2 t^2}\right]\right\}. \qquad (5.41)$$

Близкий к изинговскому случай анизотропии

Рассмотрим аксиально симметричный случай с сильной анизотропией: $\Delta_z^2 \gg \Delta_x^2 = \Delta_y^2$. В этом случае, как было указано в [I], следует в первую очередь учесть вращение спинов в локальных полях $h_i^z(t)$. Такие повороты перестановочны между собой. В каждой паре вершин главной цепи, сшивающих соседние звенья, одна вершина также соответствует повороту вокруг оси z и, следовательно, перестановочна с взаимодействиями $h_j^z(t)$ или $h_i^z(t)$, одевающими сшиваемые линии спинов i и j. Поэтому при наличие этой вершины на линии одевание последней полями $h^z(t)$ проводится так же как и при ее отсутствии. Вершину с такими свойствами будем обозначать стрелкой, чтобы отличать ее от второй вершины в паре, соответствующей вращению вокруг оси y и меняющей вид автокорреляционной функции. Первые две диаграммы ряда для $\Gamma'_x(\vec{k},t)$ примут следующий вид:

(5.42)

с одинаковой явной записью

$$-E_{\vec{k}}\,\Delta_z^2\int_0^t \Gamma_\perp(t-t_1)\dot{\Gamma}_\perp(t_1)\,dt_1 \qquad , \qquad (5.43)$$

где $\dot{\Gamma}_\perp(t)=-\Delta_z^2\varphi(t)\Gamma_\perp(t)$, а $\varphi(t)=\int_0^t dt'\,\Gamma_z(t')$. По этим же правилам выполним одевание линий главной цепи и в остальных членах ряда для $\Gamma'_x(\vec{k},t)$: x и y линии одеваем только полями $h^z(t)$, z -линии одеваем прежним образом. Более сложные диаграммы отбро-

сим. Полученная таким путем последовательность диаграмм суммируется с помощью следующей системы диаграммных уравнений:

$$\Gamma'_x(\vec{k},t) =$$

$$\Psi(\vec{k},t) =$$

$$\Psi(\vec{k},t,t') = \qquad (5.44)$$

t t′ 0

t′ t′ t′

t t_1 t′ t_2 0 t t_1 t′ t_2 0

Система уравнений (5.44) в явной записи имеет следующий вид:

$$\Gamma'_x(\vec{k},t)=\int_0^t[\Psi(\vec{k},t,t_1)+\Gamma_\perp(t-t_1)\Psi(\vec{k},t_1)]dt_1 ,$$

$$\Psi(\vec{k},t)=-E_{\vec{k}}\Delta_z^{-2}\dot{\Gamma}_\perp(t) + E_{\vec{k}}\int_0^t dt_1\,\varphi(t-t_1)\times$$

$$\times\left[\Gamma_\perp(t-t_1)\Psi(\vec{k},t_1)+\Psi(\vec{k},t,t_1)\right], \qquad (5.45)$$

$$\Psi(\vec{k},t,t')=-E_{\vec{k}}\Delta_z^{-2}\dot{\Gamma}_\perp(t-t')\left[\Gamma_\perp(t')+\Gamma'_x(\vec{k},t')\right]+$$

$$+E_{\vec{k}}^2\int_{t'}^t dt_1\,\Gamma_\perp(t-t')\Gamma_\perp(t_1)\Gamma_\perp(t_1-t')\varphi(t-t_1)\varphi(t')+$$

$$+E_{\vec{k}}^{2}\int_{t'}^{t}dt_1\int_{0}^{t'}dt_2\,\Gamma_1(t-t')\varphi(t-t_1)\Gamma_1(t_1-t')\varphi(t'-t_2)\times$$
$$\times\left\{\Gamma_1(t_1-t_2)\psi(\vec{k},t_2)+\Psi(\vec{k},t_1,t_2)\right\}.$$

Учтенные в (5.44) диаграммы близки по внешнему виду к диаграммам (5.29) приближения "цепей". Различия заключаются в том, что в этот раз мы учли часть дополнительных z -дуг, отброшенных там, однако взамен отбросили все x -и y -дуги, как приводимые так и нет, при одевании x - и y -линий. Такие изменения позволяют в анизотропном случае повысить точность приближенных уравнений.

Изотропный случай

В этом случае наиболее простое уравнение (4.4) для автокорреляционной функции было получено при допущении перестановочности вершин. В таком приближении дополнительные дуги на диаграммах суммируются наравне с приводимыми диаграммами и дают единую автокорреляционную функцию на всем интервале существования каждого спина главной цепи. Для $\Gamma'(\vec{k},t)$ имеем следующий ряд по числу спинов главной цепи

$$\Gamma'(\vec{k},t)=2E_{\vec{k}}\int_{0}^{t}dt_1\int_{0}^{t_1}dt_2\,\Gamma(t-t_2)\Gamma(t_1)+ \tag{5.46}$$
$$+(2E_{\vec{k}})^2\int_{0}^{t}dt_1\int_{0}^{t_1}dt_4\int_{t_4}^{t_1}dt_2\int_{t_4}^{t_1}dt_3\,\Gamma(t-t_2)\Gamma(t_1-t_4)\Gamma(t_3)+\dots,$$

который можно изобразить в виде следующего диаграммного ряда

$$\Gamma'(\vec{k},t)= \underset{t\ \ t_1}{\overset{t_2\ \ 0}{[\ ]}} + \underset{t\ \ t_1\ \ t_3}{\overset{t_2\ \ t_4\ \ 0}{[\ ]}} + \underset{t\ \ t_1\ \ t_3\ \ t_5}{\overset{t_2\ \ t_4\ \ t_6\ \ 0}{[\ ]}} + \dots . \tag{5.47}$$

Причем каждый член в (5.47) содержит все диаграммы, отличающиеся расположением вершин на одной линии. Например, второй член ряда (5.46) содержит также диаграмму

$t \quad t_1 \quad t_2 \quad t_3 \quad t_4 \quad 0$,

получающуюся из приведенной в (5.47) перестановкой вершин t_2 и t_3 . Рассматриваемое сейчас приближение отличается от приближения "цепей" тем, что если там мы отбрасывали дополнительные дуги, то теперь мы их приближенно суммируем с некоторым завышением коэффициентов.

Введем вспомогательную функцию $\Gamma(\vec{k},t,t')$, которая определяется тем же рядом (5.46), (5.47) без интегрирования по второму концу первой линии, тогда

$$\Gamma'(\vec{k},t)=\int_0^t \Gamma(\vec{k},t,t')dt' . \tag{5.48}$$

Для этой функции из (5.46), (5.47) получаем уравнение

$$\begin{aligned}\Gamma(\vec{k},t,t')&=2E_{\vec{k}}\,\Gamma(t-t')\int_{t'}^{t}\Gamma(t_1)dt_1+\\&+2E_{\vec{k}}\,\Gamma(t-t')\int_0^{t'}dt_2\int_{t'}^{t}dt_1\,\Gamma(\vec{k},t_1,t_2)\end{aligned} \tag{5.49}$$

Будем искать решение этого уравнения в виде ряда (5.33). Для коэффициентов получаем рекурентные уравнения $(k+m+1=2n)$

$$\begin{aligned}C_{\ell m}(\vec{k})&=2E_{\vec{k}}(-1)^{m+n-1}\sum_{2p\geqslant m}^{2n-2}\frac{M_{2p}\,M_{2(n-p-1)}}{(2p-m)!\,m!\,(2n-2p-1)!}-\\&-2E_{\vec{k}}(-1)^{\ell+n-1}\sum_{2p\geqslant\ell}^{2n-2}\frac{M_{2p}\,M_{2(n-p-1)}}{(2p-\ell)!\,\ell!\,(2n-2p-1)!}+\end{aligned} \tag{5.50}$$

$$+2E_{\vec{k}}\sum_{2p=0}^{2n-3}\sum_{p_1=0}^{\min(2p,m-1)}(-1)^{p+p_1}\frac{M_{2p}a_{\ell+p_1-2p-1,\,m-1-p_1}(\vec{k})}{(2p-p_1)!\,p_1!\,(\ell+p_1-2p)(m-p_1)}-$$

$$-2E_{\vec{k}}\sum_{2p\geq\ell}^{2n-3}\sum_{q=0}^{2n-2p-3}(-1)^{p+\ell}\frac{M_{2p}a_{q,\,2n-3-2p-q}(\vec{k})}{(2p-\ell)!\,\ell!\,(q+1)(2n-2-2p-q)}\ .$$

Первые коэффициенты:

$$a_{10}(\vec{k})=-a_{01}(\vec{k})=2E_{\vec{k}}\ ,\quad a_{30}(\vec{k})=-a_{03}(\vec{k})=-8E_{\vec{k}}M_2/3!\ ,$$

$$a_{21}(\vec{k})=-a_{12}(\vec{k})=3E_{\vec{k}}M_2+2E_{\vec{k}}^2\ .$$

Уравнения (5.50) легко решаются в случае неодетых линий, т.е. при $\Gamma(t)=1$. После суммирования ряда, имеем

$$\bar{\Gamma}'(\vec{k},t)=\frac{I_1\{[2E_{\vec{k}}]^{1/2}2t\}}{t\,[2E_{\vec{k}}]^{1/2}}-1\ . \qquad (5.51)$$

Полученный для $\bar{\Gamma}'(\vec{k},t)$ результат (5.51) отличается от (5.38) вследствие сделанного допущения о перестановочности вершин.

Особенности

Рассмотрим поведение функции $\Gamma'_x(\vec{k},t)$ в окрестности точки τ_ℓ, в которой автокорреляционные функции $\Gamma'_\alpha(t)$ имеют особенности. Начнем с изотропного случая. Подставив $\Gamma(t)$ в виде (4.15) в первые члены ряда (5.46) и сохранив при вычислении интегралов (см. Приложение C) только главные части, находим

$$\Gamma'(\vec{k},t)\approx\frac{2E_{\vec{k}}c_0^2}{(t-i\tau_0)^2}\left[1-0{,}71c_0E_{\vec{k}}+0{,}26(c_0E_{\vec{k}})^2-\ldots\right]\ . \qquad (5.52)$$

Поскольку для изотропного случая сохраняется полный магнитный момент системы, то

$$\Gamma'(\vec{k}=0,t)=\sum_{j(\neq i)}\Gamma_{ij}(t)=1-\Gamma(t)\ . \qquad (5.53)$$

Из (5.53) следует, что вблизи особенности

$$\Gamma'(0,t)\approx-\Gamma(t)\approx c_o\,(t-i\tau_o)^{-2}\ . \qquad (5.54)$$

В рассматриваемом случае, согласно (4.5), $c_o=\Delta^{-2}=1$, а из (5.26) находим $E_o=\Delta^2=1$. Подставив эти значения параметров в (5.52), находим сумму приведенных членов в скобке равной 0,55. Тогда как сравнение (5.52) с (5.54) дает для суммы всех членов в скобке 0,5, что показывает быструю сходимость стоящего в скобке ряда.

Вернемся к общему случаю уравнений (5.28) и исследуем поведение функции $\Gamma'_x(\vec{k},t)$ вблизи особенности. Рассмотрим первые члены ряда (5.20) для $G_x(\vec{k},t)$ в этой области. На основании (5.II) и (4.I5) находим

$$G_x^{(2)}(\vec{k},t)\approx 2E_{\vec{k}}\,c_z c_y\,(t-i\tau_\infty)^{-4}\ . \qquad (5.55)$$

$G_x^{(4)}(\vec{k},t)$ является суммой шести диаграмм (5.I2), (5.I3) и (5.I6), которые отличаются от двух диаграмм для $G_x^{(4)}(t)$ только коэффициентами. Используя (4.I8) и (5.26), находим

$$G_x^{(4)}(\vec{k},t)=-(10-\pi^2)c_x E_{\vec{k}}\left[E_{\vec{k}}(c_y^2+c_z^2)-2c_y^2\Delta_y^2-2c_z^2\Delta_z^2\right](t-i\tau_\infty)^{-4}\ . \qquad (5.56)$$

Поскольку формулы для $G_x(\vec{k},t)$ и $G_x(t)$ связывают эти функции с произведением автокорреляционных функций $\Gamma_\alpha(t_i-t_j)$ однотипным образом, то основываясь на анализе, выполненном в [I], ожидаем, что главная часть всего ряда для $G_x(\vec{k},t)$ имеет вид

$$G_x(\vec{k},t)\approx 6\,a_x(\vec{k})\,(t-i\tau_\infty)^{-4}\ . \qquad (5.57)$$

В силу (5.57) величина интегралов в правой части уравнения (5.28) определяется значениями подынтегральных выражений при $t_1 \to 0$. В первом интеграле (5.28) можно положить $\Gamma_x(t_1)=\Gamma_x(0)=1$. В двух других так сделать нельзя, поскольку $\Gamma'_x(\vec{k},0)=0$, и нужно брать для $\Gamma'_x(\vec{k},t_1)$ первый член разложения по t_1: $\Gamma'_x(\vec{k},t_1)\approx E_{\vec{k}}\, t_1^2$. Такая временная зависимость числителя приведет к уменьшению степени малой величины в знаменателе главной части этих интегралов. Пренебрегая, поэтому, двумя последними интегралами в правой части уравнения (5.28) по сравнению с первым, получаем

$$\Gamma'_x(\vec{k},t)\approx \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2\, G_x(\vec{k},t_1-t_2)\approx a_x(\vec{k})(t-i\tau_\infty)^{-2}. \quad (5.58)$$

Первые два члена ряда для $a_x(\vec{k})$ мы получаем из (5.55) и (5.56):

$$a_x(\vec{k})=(1/3)c_z c_y E_{\vec{k}} - -(1/6)(10-\pi^2)c_x E_{\vec{k}}\left[E_{\vec{k}}(c_y^2+c_z^2)-2c_y^2\Delta_y^2-2c_z^2\Delta_z^2\right]+\dots \quad (5.59)$$

С другой стороны, мы можем вычислять $a_x(\vec{k})$ методом моментов, как это описано в [I] при вычислении C_α. Если нам известен момент $M'_{x2n}(\vec{k})$ порядка $2n$ функции $\Gamma'_x(\vec{k},t)$, то на основании формулы (4.24) и подобной формулы для $a_x^{(2n)}(\vec{k})$ имеем

$$a_x(\vec{k})\approx c_x M'_{x2n}(\vec{k})/X_{2n} \quad . \quad (5.60)$$

Наконец, рассмотрим вблизи особенности уравнения (5.44) и (5.45) приближения сильной анизотропии. Вследствие свойства (5.58) в ряду для $\Gamma'_x(\vec{k},t)$ оставим только неприводимые диаграммы:

$\Gamma'_x(\vec{k},t)\approx 2$ [диаграмма, t_1] + [диаграмма, t_1, t_2] + (5.6I)

$+$ [diagram] $+ 2$ [diagram] $+ \dots$.

В (5.6I) мы, введя коэффициент 2, объединили пары диаграмм, переходящих друг в друга при изменении направления времени, и дающих, поэтому, одинаковый вклад в $\Gamma'_x(\vec{k},t)$. Вблизи особенности в явных выражениях для диаграмм в (5.6I) (см.(5.42)-(5.45)) в сомножителях, определяющих расходимость, возьмем

$$\Gamma_\perp(t) \approx -c_\perp (t - i\tau_A)^{-2} \quad , \qquad (5.62)$$

а $\Gamma_z(t)$ в виде (4.I5). Напри ър, для слагаемого в (5.6I) с двумя вершинами, согласно (5.43), имеем

$$E_{\vec{k}}\, c_\perp c_z \,(t - i\tau_A)^{-2}. \qquad (5.63)$$

При вычислении главной части интеграла в (5.43) мы заменили $\Gamma_\perp(t-t_1)$ на $\Gamma_\perp(0) = 1$. Точно также для второй диаграммы в (5.6I) мы заменим в явном выражении для нее единицей $\Gamma_\perp(t-t_1)$ и $\Gamma_\perp(t_2)$ и получим после вычисления интегралов

$$-(1/6) E^2_{\vec{k}}\, c_\perp c_z^2 \,(t - i\tau_A)^{-2} . \qquad (5.64)$$

Для третьей диаграммы в (5.6I) сомножителями, не участвующими в формировании расходимости, будут $\varphi(t_2)$ и $\varphi(t-t_1)$. При значениях аргументов, при которых подынтегральные выражения расходятся: $t_2 \to 0$, а $t_1 \to t$, эти функции можно заменить, соответственно, на t_2 и $t - t_1$. После такой замены для определения главной части этого члена по..учаем интеграл

$$-E^2_{\vec{k}}\, c_\perp^3 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \,\frac{t_2(t-t_1)}{(t_1 - i\tau_A)^2[(t_1-t_2)-i\tau_A]^2[(t-t_2)-i\tau_A]^2} \approx \qquad (5.65)$$

$$\approx -(1/2) E_{\vec{k}}^{2} c_{\perp}^{3} (10-\pi^{2}) (t - i\tau_{A})^{-2} ,$$

вычисление которого описано в Приложении С. Суммируя (5.62)-(5.64) находим в этом приближении для $a_x(\vec{k})$ следующее начало ряда

$$a_x(\vec{k}) = c_{\perp} c_z E_{\vec{k}} \left[1 - (1/6) c_z E_{\vec{k}} - (1/2) c_{\perp}^{2} (10-\pi^{2}) \frac{E_{\vec{k}}}{c_z} \right] + \dots \quad (5.66)$$

Подобным образом можно найти вклады от следующих диаграмм. Вместе с тем вычисление $a_x(\vec{k})$ в этом случае также может быть выполнено методом моментов по формуле (5.60).

КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ СУММАРНОГО МАГНИТНОГО МОМЕНТА СИСТЕМЫ

Уравнение общего вида

Рассмотрим корреляционную функцию

$$\Gamma_x(\vec{k},t) = \Gamma_x'(\vec{k},t) + \Gamma_x(t) = \sum_j \Gamma_{ij} \exp\{ i(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\vec{k} \} . \quad (6.1)$$

Складывая уравнения (2.17) и (5.28), получаем

$$\frac{d}{dt} \Gamma_x(\vec{k},t) = -\int_0^t \Sigma_x(\vec{k},t_1) \Gamma_x(\vec{k},t-t_1) dt_1 , \quad (6.2)$$

где

$$\Sigma_x(\vec{k},t) = G_x(t) - G_x(\vec{k},t) .$$

Уравнение (6.2) в частном случае изотропного гамильтониана выведено в работе [4']. В анизотропном случае суммарный магнитный момент не является интегралом движения и практический интерес представляет автокорреляционная функция суммарного момента, определяемая (6.1), (6.2) при $\vec{k} = 0$, которую мы будем обозначать $M_x(t)$. Уравнения для $M_x(t) = \Gamma_x(0,t)$

$$\frac{d}{dt}\mathcal{M}_x(t) = -\int_0^t \Sigma_x(0,t_1)\mathcal{M}_x(t-t_1)dt_1 \tag{6.3}$$

рассматривались в работах [5',6'] для усеченного дипольного гамильтониана.

Рассмотрим сейчас уравнения (6.2), (6.3) при различной величине анизотропии (при произвольном параметре $\xi = J^x_{ij}/J^z_{ij}$), ограничившись для простоты случаем аксиальной симметрии $J^x_{ij} = J^y_{ij}$ гамильтониана (I.I).[*] Суммирование двух функций в ядре уравнений (6.2) или (6.3) удобно выполнять отдельно для каждой диаграммы. Выше мы показали, что все диаграммы, которые содержатся в $G_x(t)$ представлены и в $G_{xij}(t)$ (и в $G_x(\vec{k},t)$) с соответствующим изменением крайних вершин и коэффициентов. Кроме того в $G_{xij}(t)$ содержатся диаграммы, которых нет в $G_x(t)$.

Начнем с общих диаграмм. Таковыми в $G_{xij}(t)$ являются диаграммы с двумя или тремя спинами в главной цепи и дополнительными дугами только на одной из линий (у одного из спинов), причем при трех спинах эти дуги могут быть только на средней линии. После суммирования коэффициентов перед диаграммами получаем, что для общих диаграмм явное выражение для случая объединенного ядра в (6.2) получается из такового для $G_{x\alpha\beta}(t)$, найденного в [I] (см. (2.I9)-2.24) и рис.), домножением на коэффициент $V_{\alpha\beta}(\vec{k})$, величина которого зависит от индексов проекции (α и β) крайних дуг на диаграмме для $G_{x\alpha\beta}(t)$ следующим образом:

$$V_{zz}(\vec{k}) = A^2_{\vec{k}}\,, \quad V_{yy}(\vec{k}) = F^2_{\vec{k}}\,\xi^{-2}\,, \qquad V_{zy}(\vec{k}) = V_{yz}(\vec{k}) = -A_{\vec{k}}F_{\vec{k}}/\xi\,, \tag{6.4}$$

[*] Напомним, что время и частота измеряются в единицах $\sqrt{\Delta^2_x}$ (см. (I.4)), в частности $\Delta^2_x = \xi^2\Delta^2_z = 1$.

где

$$A_{\vec{k}} = (1 - \xi U_{\vec{k}}), \quad F_{\vec{k}} = (U_{\vec{k}} - \xi), \tag{6.5}$$

$$U_{\vec{k}} = E_{\vec{k}} \xi = E_{\vec{k}} / E_{\vec{k}=0} .$$

Таким путем на основании результатов для $G_x^{(2m)}(t)$ при m = I, 2, 3, 4 можно легко найти соответствующий общим диаграммам вклад в $\sum_x^{(2m)}(\vec{k},t) = G_x^{(2m)}(t) - G_x^{(2m)}(\vec{k},t)$ и в моменты до десятого порядка. Например, для m = I и m = 2 имеем: $\left(\check{A}_{\vec{k}}^2 = A_{\vec{k}}^2 + \xi^2 (1 - U_{\vec{k}}^2) \right)$

$$\sum_x^{(2)}(\vec{k},t) = \check{A}_{\vec{k}}^2 G_x^{(2)}(t) / (1+\xi^2) = \Delta_z^2 \check{A}_{\vec{k}}^2 \Gamma_z(t) \Gamma_y(t) ,$$

$$\sum_x^{(4)}(\vec{k},t) = A_{\vec{k}}^2 G_{xzz}^{(4)}(t) + \xi^{-2} F_{\vec{k}}^2 G_{xyy}^{(4)}(t) , \tag{6.6}$$

где $G_{xzz}^{(4)}(t)$ и $G_{xyy}^{(4)}(t)$ – первое и второе слагаемые в (2.22).

При m = 3 помимо общих о $G^{(6)}(t)$ в $\sum_x^{(6)}(\vec{k},t)$ содержатся новые диаграммы (5.I4), (5.I7) и (5.I8), имеющие в явном выражении одно и то же произведение автокорреляционных функций и отличающиеся коэффициентами. Сложив эти коэффициенты, получаем суммарный коэффициент:

$$2 \Delta_z^4 U_{\vec{k}} F_{\vec{k}} A_{\vec{k}} .$$

Будем обозначать через $D_x^{(2m)}(\vec{k},t)$ вклад в $\sum_x^{(2m)}(\vec{k},t)$ от новых диаграмм. По известной диаграмме расставить индексы проекций и моменты времени в аргументах произведения восьми функций $\Gamma_\alpha(t_p \cdot t_q)$ в $D_x^{(6)}(\vec{k},t)$ не составляет труда. Обратим внимание, что интегрирование по концу (t_3) первой линии и началу (t_4) последней (см. (5.I8)) проводится в одинаковых пределах от t_5 до t_2. Наконец, по правилам описанным в [I] находим первые два коэффициента $D_{x4}^{(6)}(\vec{k})$ и $D_{x6}^{(6)}(\vec{k})$ ряда по степеням времени для $D_x^{(6)}(t)$.

$$D_{x4}^{(6)}(\vec{k}) = 4\Delta_z^4 U_{\vec{k}} A_{\vec{k}} F_{\vec{k}} \,,$$
$$D_{x6}^{(6)}(\vec{k}) = 2\Delta_z^4 U_{\vec{k}} A_{\vec{k}} F_{\vec{k}} \left[15 Z_2 Y_2 + 8 X_2 \right] . \qquad (6.7)$$

Формулы (6.4), (6.5) и (6.7) позволяют полностью определить три первых члена ряда для $\Sigma_x(\vec{k},t)$. Подставив эти члены в уравнение (6.2) мы можем описанными в [I] путем найти точные выражения для первых трех моментов корреляционной функции $\Gamma_x(\vec{k},t)$:

$$M_{x2}(\vec{k}) = \Delta_z^2 \check{A}_{\vec{k}}^2 \,,$$
$$M_{x4}(\vec{k}) = \Delta_z^4 \check{A}_{\vec{k}}^4 + \check{A}_{\vec{k}}^2 (2\Delta_z^4 + 3\Delta_z^2) + \Delta_z^2 F_{\vec{k}}^2 - \Delta_z^2 (1 - U_{\vec{k}}^2) \,, \qquad (6.8)$$
$$M_{x6}(\vec{k}) = \Delta_z^6 \check{A}_{\vec{k}}^6 + 2\check{A}_{\vec{k}}^4 (2\Delta_z^6 + 3\Delta_z^4) + 2\Delta_z^4 \check{A}_{\vec{k}}^2 F_{\vec{k}}^2 + - (1-U_{\vec{k}}^2)(15\Delta_z^2 + 7\Delta_z^4 + 2\Delta_z^4 \check{A} \ldots$$
$$+ F_{\vec{k}}^2 (7\Delta_z^4 + 15\Delta_z^2) + \check{A}_{\vec{k}}^2 (10\Delta_z^6 + 37\Delta_z^4 + 27\Delta_z^2) + \check{A}_{\vec{k}} F_{\vec{k}} 2\Delta_z^4 (\xi + 2U_{\vec{k}}) .$$

В частности для моментов корреляционной функции $\mathcal{M}_x(t)$ суммарного магнитного момента (т.е. при $\vec{k} = 0$, когда в (6.5) следует взять $U_0 = 1$, $A_0 = F_0 = (1 - \xi)$), (6.8) дает

$$M_2 = \Delta_z^2 (1 - \xi)^2 \,,$$
$$M_4 = \Delta_z^4 (1 - \xi)^2 (3 + 5\xi^2 - 2\xi) \,, \qquad (6.9)$$
$$M_6 = \Delta_z^6 (1 - \xi)^2 (15 + 66\xi^2 + 51\xi^4 - 18\xi^3 - 12\xi) .$$

В (6.9) и далее в настоящем разделе мы используем для моментов $\mathcal{M}_x(t)$ традиционное обозначение M_{2n} вместо $M_{x2n}(\vec{k}=0)$.

Из уравнения (6.2) точно так же как ранее из уравнений (2.I7) и (5.28) в окрестности особой точки находим

$$\Gamma_x(\vec{k},t) \approx v_x(\vec{k})(it + \tau_\infty)^{-2} \approx \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \, \Sigma_x(\vec{k}, t_2) \,. \qquad (6.\mathrm{I}0)$$

Подставив (5.58), (4.I5) и (6.I0) в (6.I), имеем

$$v_x(\vec{k}) = c_x - a_x(\vec{k}) . \qquad (6.II)$$

Этот коэффициент может быть найден приближенно через полные моменты по аналогичной (5.59) формуле

$$v_x(\vec{k}) \approx c_x M_{x2n}(\vec{k}) / X_{2n} \quad . \qquad (6.I2)$$

Наряду с этим, выражение для $v_x(\vec{k})$ может быть получено в виде ряда после подстановки в (6.I0) выражений для главной части ядра. Так, подставив (6.6) с учетом (4.I6), (4.I8) в (6.8), находим

$$v_x(\vec{k}) = (1/6) c_x c_z \Delta_z^2 \check{A}_{\vec{k}}^2 + (1/6)(10-\pi^2)\Delta_z^4 \left(c_x c_z^2 A_{\vec{k}}^2 + c_x^3 \xi^2 F_{\vec{k}}^2\right) + \ldots \quad . \qquad (6.I3)$$

На основании (6.I0) для далеких Фурье-компонент корреляционной функции $\Gamma_x(\vec{k},t)$ имеем

$$f_{\vec{k}}(\omega) \approx v_x(\vec{k}) |\omega| exp(-|\omega| \tau_\infty). \qquad (6.I4)$$

Параметры τ_∞, c_x, c_z рассчитаны в [I] для некоторых случаев анизотропии и приведены там в табл.2.

Возьмем в качестве примера гамильтониан усеченного дипольного взаимодействия ($\xi = -1/2$, $\Delta_z^2 = 4$). Для трех первых моментов корреляционной функции $\mathcal{M}_x(t)$ по формулам (6.9) получаем: $M_2 = 9$, $M_4 = 189$, $M_6 = 6183$. Дополнительно с помощью формул (6.4), (6.6), (6.7) и результатов [I] мы нашли также вклад в восьмой момент от всех учтенных диаграмм: $M_8' = 290277$. Ранее для такого гамильтониана в работе [22'] были рассчитаны моменты M_2 , M_4, M_6, M_8 для трехмерной кубической решетки. В пределе $d \to \infty$ в приведенных в этой работе формулах для M_{2n} следует оставить

только часть, пропорциональную наивысшей степени второго момента: $(M_2)^n$. Таким путем находим точное значение восьмого момента: $M_8 = 297837$ (моменты M_4 и M_6, найденные таким путем и по формуле (6.9), как и должно быть, совпали). Подставив это значение M_8 и значение X_8 из таблицы I в формулу (6.I2), находим при $\xi = -1/2$

$$\mathcal{V}_x(0) \approx 1{,}1\,\frac{297837}{100469} \approx 3{,}26\ . \quad (6.I5)$$

Интересно сравнить этот результат с результатом, полученным по двум членам в формуле (6.I3):

$$\mathcal{V}_x(0) \approx C_x\left[(9/6)C_z + (0{,}13/6)(36C_z^2 + 9C_x^2)\right] \approx 1{,}3\ . \quad (6.I6)$$

Наконец, подставив (6.I5) в (6.I4) мы получаем выражение для далеких крыльев линии поглощения ЯМР

$$f(\omega) \approx 29{,}3\,\frac{|\omega|}{M_2}\,exp\left(-3{,}7\,\frac{|\omega|}{M_2^{1/2}}\right)\ , \quad (6.I7)$$

в котором мы для удобства его использования выразили значения параметров в единицах второго момента $M_2 = 9\Delta_x^2$.

Итак, уравнение (6.2) позволяет найти в рассматриваемом приближении СФП корреляционную функцию суммарного спина при произвольном волновом векторе $\vec{k}$. Входящие в ядро интегрального уравнения (6.2) автокорреляционные функции определяются на основании самосогласованных уравнений, найденных в [I]. При сохранении в ряду для ядра всех диаграмм с 2, 4, 6 и 8-ми вершинами, указанных в [I] и домноженных на соответствующим коэффициенты (6.4), а также дополнительных диаграмм (5.I4), (5.I7) и (5.I8) с шестью вершинами, рассчитанная по уравнению (6.2) функция $\Gamma_x(\vec{k},t)$ будет являться хорошим приближением для точной функции. Ее спектр будет иметь правильные моменты в приближении СФП M_2, M_4, M_6 и незначительно заниженные более высокие моменты (как было показано

выше при $\xi=-1/2$ восьмой момент меньше точного на 2,5%). Крылья спектра этой функции могут быть определены по простой асимптотической формуле (6.I4), тогда как для получения центральной части спектра приходится численно решать уравнение (6.2). Недостатком уравнения (6.2) при его использовании на практике является его сложность, поэтому получим более простые приближенные варианты уравнений.

Прежде всего возьмем уравнение (6.2) с одним или двумя членами ряда для функции памяти (решение их будем обозначать через $\Gamma_{x1}(\vec{k},t)$ и $\Gamma_{x2}(\vec{k},t)$, соответственно). Поскольку для $\Sigma^{(2)}_{x2n}(\vec{k})$ и $\Sigma^{(4)}_{x2n}(\vec{k})$ мы можем получить на основании формул (3.8), (3.9) с учетом (6.6) общие выражения:

$$\Sigma^{(2)}_{x2n}(\vec{k}) = \Delta_z^2 \check{A}^2_{\vec{k}} \sum_{m=0}^{n} \binom{2n}{2m} Y_{2(n-m)} Z_{2m} ,$$

$$\Sigma^{(4)}_{x2n}(\vec{k}) = \Delta_z^4 \sum_{p+m+q+f+\ell=n-1} K^{2p2m}_{2\ell 2f 2q} X_{2f} \times \tag{6.I8}$$

$$\times \left[A^2_{\vec{k}} Z_{2p} Z_{2m} Y_{2\ell} Y_{2q} + \xi^2 F_{\vec{k}} Y_{2p} Y_{2m} Z_{2\ell} Z_{2q} \right] ,$$

то в этом случае по формуле (3.7) в принципе, могут быть рассчитаны моменты $M^{(\ell)}_{x2n}(\vec{k})$ любого порядка. Входящие в (6.I8) моменты автокорреляционной функции предполагаются известными. Они в свою очередь могут рассчитываться или по общим формулам [I] или также приближенно по формулам (3.7)-(3.9) для уравнения (2.I7) с одним или двумя членами ряда для функции памяти. В рассматриваемом сейчас случае коэффициент $\nu_{x\ell}(\vec{k})$ определяется по двум членам ряда в формуле (6.I3) полностью, следовательно полностью определены и крылья спектра, поскольку мы считаем известными параметры $C_{x\ell}$, $C_{z\ell}$, τ_ℓ.

Для нахождения центральной части спектра нужно численно решать

уравнения для $\Gamma_{x1}(\vec{k},t)$ или $\Gamma_{x2}(\vec{k},t)$. Эти уравнения проще исходного. Вдобавок можно упростить расчет с помощью известных моментов (6.18) для функции памяти. Численное решение для $\mathcal{M}_{x1}(t)$ и $\mathcal{M}_{x2}(t)$ выполнено в работе [5′] конкретно для случая усеченного дипольного взаимодействия $(\xi = -1/2)$. Следует отметить, что в указанной работе в $G_x^{(4)}(t)$ помимо учтенных нами вкладов добавлена часть вкладов, содержащих петли из связей в решеточных суммах. Для трехмерной кубической решетки расчет [3] дает, что такие суммы почти в десять раз меньше учтенных в (6.6), (6.18) сумм без петель, и их добавление практически не скажется на виде $\mathcal{M}_x(t)$ и форме спектра.

Уравнения для близкой к изинговской анизотропии.

Рассмотрим теперь случай сильной анизотропии гамильтониана $(\xi^2 \ll 1)$. Выполнив в первую очередь учет вращения спинов в поле $h^z(t)$, направленном вдоль выделенной оси z, мы получили в [1] для автокорреляционной функции уравнение (2.32), а в предыдущем разделе для перекрестной корреляционной функции уравнение (5.45). Поскольку эти уравнения получены по разным правилам, то их неудобно складывать. Уравнение (2.32) при полном ряду для $R_x(t)$ формально строгое, и в нем проведена только перегруппировка членов ряда по сравнению с уравнением (2.17). Наоборот в уравнении (5.45) или (5.44) мы сознательно отбросили часть членов, содержащих дуги с полями h^x и h^z при одевании линий, зато провели более полный, чем в исходном ряду, учет полей h^z в диаграммах с тем же числом вершин.

Использовав те же правила, что и при выводе (2.32), получаем из (5.28) следующее уравнение (см. также Приложение Е)

$$\Gamma_x'(\vec{k},t)=\int_0^t dt_1\,\Gamma_1(t-t_1)\int_0^{t_1} dt_2\, G_x(\vec{k},t_1-t_2)\Gamma_x(t_2)+$$
$$+\int_0^t dt_1\,\Gamma_1(t-t_1)\int_0^{t_1} dt_2\left[G_x(\vec{k},t_2)-R_x(t_2)\right]\Gamma_x'(\vec{k},t_1-t_2)\,, \tag{6.18}$$

которое уже легко суммируется с (2.32) в отличное от (6.2) уравнение для полной корреляционной функции

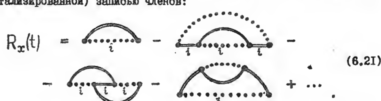
$$\Gamma_x(\vec{k},t)=\Gamma_1(t)-\int_0^t dt_1\,\Gamma_1(t-t_1)\times$$
$$\times\int_0^{t_1} dt_2\left[R_x(t_1-t_2)-G_x(\vec{k},t_1-t_2)\right]\Gamma_x(\vec{k},t_2)\,. \tag{6.19}$$

Уравнение (6.19) при сохранении в функции памяти только членов с двумя вершинами (первого члена в ряду (2.33)) подробно анализировалось нами в работе [15'] при $\vec{k}=C$ и $\xi=-1/2$. Это уравнение при большой анизотропии дает более эффективное приближение точного решения. В [1] мы это проиллюстрировали на примере автокорреляционной функции, а сейчас покажем для функции $\mathcal{M}_x(t)$. Определим моменты M_4' и $M_4^{(1)}$ для решений уравнений (6.19) и (6.3) при сохранении в функции памяти членов с двумя вершинами

$$M_4'=(1-\xi)^2\Delta_z^4\left[2+4\xi^2-2\xi+(1+\xi)/(1-\xi)\right]\,,$$
$$M_4^{(1)}=(1-\xi)^2\Delta_z^4\left(2-2\xi+4\xi^2\right)\,. \tag{6.20}$$

Сравнение (6.20) с точным значением (6.9) показывает, что разница $\Delta M_4'=M_4'-M_4$ исчезает, а $\Delta M_4^{(1)}=M_4^{(1)}-M_4$ сохраняется в пределе $\xi\to 0$. При $\xi=-1/2$ $\Delta M_4'$ составляет 17,5%, а $\Delta M_4^{(1)}$ составляет 24% от M_4.

Попробуем теперь уравнять (2.32) с (5.45) с целью объединения этих уравнений. Точно так же как и при выводе (5.44) договоримся одевать x и y линии только полями $h^{z}(t)$, а z -линии - прежним образом. Тогда для $R_x(t)$ получим ряд с измененной (более детализированной) записью членов:



(6.2I)

Сохраним в (6.2I) одну первую диаграмму, *) а в уравнении для $\Psi(\vec{k},t,t')$ в (5.44) две первые диаграммы, дающие первый член в уравнении для $\Psi(\vec{k},t,t')$ (5.45). Решим полученную систему уравнений (5.45) и уравнение (2.32) с помощью преобразования Лапласа. Сложив выражения, найденные для образов Лапласа $\Gamma_x(s)$ и $\Gamma_x'(\vec{k},s)$ (s - параметр преобразования) от $\Gamma_x(t)$ и $\Gamma_x'(\vec{k},t)$, получаем

$$\Gamma_x(\vec{k},s)=\Gamma_\perp(s)\left[1+(2\xi U_{\vec{k}}-\xi^2 U_{\vec{k}}^2)(s\Gamma(s)-1)-(1-U_{\vec{k}}^2)R^{(2)}(s)\right]^{-1}, \qquad (6.22)$$

где $R^{(2)}(s)$ - образ Лапласа от произведения $\Gamma_\perp(t)\Gamma_z(t)$. Домножив обе части (6.22) на выражение, стоящее в знаменателе, и вернувшись от образов Лапласа к первоначальным функциям, получаем уравнение

$$\Gamma_x(\vec{k},t)=\Gamma_\perp(t)-(1-U_{\vec{k}}^2)\int_0^t\int_0^{t_2}\Gamma_\perp(t_1)\Gamma_z(t_1)\Gamma_x(\vec{k},t-t_2)\,dt_1\,dt_2\,\Gamma_\perp(t_2-t_1)+ \qquad (6.23)$$
$$+(\xi^2U_{\vec{k}}^2-2\xi U_{\vec{k}})\int_0^t\dot{\Gamma}_\perp(t_1)\Gamma_x(\vec{k},t-t_1)\,dt_1 ,$$

которое приобретает особенно простой вид при $\vec{k}=0$, т.е. для $\mathcal{M}_x(t)$:

$$\mathcal{M}_x(t)=\Gamma_\perp(t)+(\xi^2-2\xi)\int_0^t\dot{\Gamma}_\perp(t_1)\mathcal{M}_x(t-t_1)\,dt_1 . \qquad (6.24)$$

*) Эту диаграмму вставим и на соответствующих $\Gamma_x(t)$ участках в (5.44).

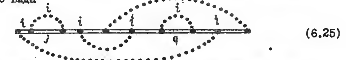
Иной способ получения уравнения (6.24), основанный на суммировании диаграммного ряда, дан нами в работе [15] (см. также Приложение Д).

Отсуммированной в (6.24) последовательности диаграмм можно дать простую физическую интерпретацию на общепринятом языке "флип-флоп" переворотов (ФФ-переворотов). Применительно к поперечным компонентам спина (S_i^x, S_i^y) ФФ-переворот заключается в изменении с i на j индекса у поперечной компоненты спина на диаграмме вследствие взаимодействия между поперечными компонентами спинов, выражающегося в повороте в поперечном поле (h^x или h^y). Наглядно можно представить это себе следующим образом: до ФФ-переворота исходный спин вращается в узле i в локальном поле h_i^z , после ФФ-переворота продолжает свое вращение в узле j в поле h_j^z . Похожее изменение локального поля имеет место при перескоках диффундирующих по решетке ядер. При таких диффузионных случайных перескоках ядер происходит усреднение и уменьшение частоты прецессии магнитного момента, тогда как ФФ-переворот является отражением когерентного процесса поворота спина в поперечном поле, которое, складываясь с продольным полем, может приводить и к ускорению суммарного вращения спина.

Вернемся к уравнению (6.24). Все отсуммированные в нем диаграммы состоят из одной одетой (двойной) линии поперечной компоненты спинов, разделенной на отрезки ФФ-переворотами. Следует различать два типа ФФ-переворотов. ФФ-перевороты, соответствующие оставленной в (6.21) первой диаграмме, относятся к автокорреляционной функции и входят всегда парами (ФФ-пара), связанными z -линиями (в момент t_p замена индекса i на j поперечной компоненты спина, а в момент t_{p+1} обратная замена j на i). Тогда как при ФФ-перевороте, соответствующему оставленным диаграммам (5.44), всякий раз поперечная компонента спина переходит на новый узел (вероятность "случайного" возврата имеет малость Z^{-1}). Поскольку в последнем

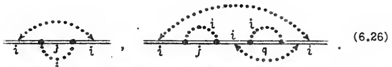
случае продольное локальное поле всякий раз новое, то усреднение по таким полям на различных отрезках полностью независимое (спаривание полей h_i^z и h_j^z $(i \neq j)$ ведет к образованию петли, вклад от которой пренебрежим в рассматриваемом пределе $d \to \infty$, как было показано в Приложении A [I]). Наоборот в случае ФФ-пары после второго ФФ-переворота спин возвращается в узел i и продолжает снова вращаться в локальном поле h_i^z , поэтому независимое усреднение по локальному полю h_i^z вращений спина на этих двух участках, использованное при выводе уравнения (6.24), является дополнительным ограничением, не вытекающим из условий $d \to \infty$ или $\xi \to 0$. Попробуем избавиться от этого ограничения.

Для учета спаривания полей h_i^z на указанных участках по разные стороны ФФ-пар в ряду (6.2I) добавляется вторая диаграмма и множество других, состоящих из произвольного числа ФФ-пар объединенных дугами с разделенными h^z -вершинами, в которых спаренные операторы h^z расположены по разные стороны ФФ-пар, например, следующего вида



(6.25)

Недостаток диаграмм такого вида в том, что на них не отражена перестановочность поворотов в продольном поле h^z , т.е. перестановочность вершин от дуг с разделенными h^z -вершинами между собой и с вершинами, уже учтенными в двойных линиях при их одевании. Подобно тому, как это было сделано при выводе уравнения (5.45), мы можем учесть это свойство вершин и получить вместо (2.32) новое интегральное уравнение, так же с бесконечным числом членов в новом ряду для ядра. Например, вторая диаграмма (6.2I) и диаграмма (6.25) войдут в этот ряд, включенными в следующие диаграммы:



$$,\quad . \qquad (6.26)$$

Все диаграммы вида (6.26) с произвольным числом ФФ-пар и дуг с разделенными вершинами (и даже более общего вида, когда ФФ-пары вставлены в линии спинов j, q, ... внутри ФФ-пар) удается просуммировать (см. Приложение Д) в предположении о постоянстве во времени продольных локальных полей ($h^z(t) = const$ или $\Gamma_z(t) = 1$). Такое предположение, обосновываемое малостью ξ, используется во многих работах [II-I5]. Для образа Лапласа $\Gamma_x(s)$ автокорреляционной функции $\Gamma_x(t)$ (s – параметр преобразования) в Приложении Д получено самосогласованное уравнение

$$\Gamma_x(s) = \Gamma_\perp(s + \Gamma_x(s)) \ , \qquad (6.27)$$

где

$$\Gamma_\perp(\Omega(s)) = \int_0^\infty exp\left\{-\Omega(s)t - \frac{\Delta_z^2 t^2}{2}\right\} dt = \qquad (6.28)$$

$$= \left(\frac{\pi}{2\Delta_z^2}\right)^{1/2} exp\left(\frac{\Omega^2(s)}{2\Delta_z^2}\right) erfc\left(\frac{\Omega(s)}{\Delta_z\sqrt{2}}\right),\ \Omega(s) = s + \Gamma_x(s) \ .$$

Уравнение (6.27) можно решать методом последовательных приближений или численно. Образ Лапласа $\Gamma_x(\vec{k},s)$ для корреляционной функции $\Gamma_x(\vec{k},t)$ выражается через $\Gamma_x(s)$ по следующей из (Д.I5) формуле

$$\Gamma_x(\vec{k},s) = \Gamma_x(s)\left[(1+u_{11}(s))^2 - \Gamma_x(s)u_{21}(s)\right]^{-1} , \qquad (6.29)$$

где

$$u_{11}(s) = u_{22}(s) = -\xi\Delta_z^2 U_{\vec{k}} \frac{d}{d\Omega(s)} \Gamma_\perp(\Omega(s)) \ ,$$

$$u_{21}(s) = \left(\xi\Delta_z^2 U_{\vec{k}}\right)^2 \frac{d^2}{(d\Omega(s))^2} \Gamma_\perp(\Omega(s)) \ . \qquad (6.30)$$

Реальная часть от (6.29) при $S = i\omega$, даст спектр корреляционной функции для любой величины волнового вектора $\vec{k}$ в приближении ФФ-переворотов в постоянных продольных полях. В частности, при $\vec{k} = 0$, $\xi = -1/2$ получаем выражение для формы линии магнитного резонанса.

Формулы (6.27)-(6.30) правильно описывают центральную часть спектра, в частности ее "расплющенность" при включении "флип-флоп"-части в диполь-дипольном взаимодействии ($\xi = -1/2$). Однако они дают гауссовы крылья спектра вместо экспоненциальных (6.17). Это произошло по той причине, что пренебрегнув изменением продольных полей во времени, мы линеаризовали уравнение для корреляционной функции. В уравнении (6.24) $\Gamma_z(t) \neq 1$, и оно дает правильные по форме асимптотики (крылья) спектра, однако в нем выброшены диаграммы, содержащие дуги с разделенными вершинами h^z. Все сложности при учете таких дуг возникают из-за запрета на расположение одной из двух вершин h^z в такой дуге между вершинами ФФ-пары. Попробуем сейчас построить приближенное уравнение, сняв это ограничение, а заодно и ограничение на размещение вершин ФФ-пары.

Итак, договоримся, что при одевании до автокорреляционной функции поперечных компонент спина на диаграммах не только пары связанных вершин h^z, но и ФФ-пары могут быть расположены любым образом на линии спина i на всем интервале существования этого спина на диаграмме (т.е. при перестановке вершин указанных дуг коэффициент перед диаграммой не изменится). Тогда вместо уравнения (6.24) мы получим следующую самосогласованную систему приближенных уравнений:

$$\frac{d}{dt}\Gamma_{эф}(t) = -\Delta_z^2 (1+\xi^2)\Gamma_{эф}(t)\int_0^t \Gamma_z(t_1)dt_1 , \qquad (6.31)$$

$$\frac{d}{dt}\Gamma_z(t) = -2\int_0^t \Gamma_{эф}^2(t_1)\Gamma_z(t-t_1)dt_1 \ , \qquad (6.32)$$

$$M_x(t) = \Gamma_{эф}(t) - \frac{2\xi}{1+\xi^2}\int_0^t \dot{\Gamma}_{эф}(t_1)M_x(t-t_1)dt_1 \ . \qquad (6.33)$$

Уравнение (6.32) для $\Gamma_z(t)$ имеет прежний вид (2.I7), (4.I) и переписано здесь для удобства при сохранении первого члена $G_z^{(2)}(t)$ в ряду (2.I8) для функции памяти и приближенной замене $\Gamma_x^2(t)$ на $\Gamma_{эф}^2(t)$. Уравнение (6.3I) отличается от кумулянтного уравнения в низшем порядке (4.3) заменой $\Gamma_y(t_1)$ на $\Gamma_z(t_1)$ под интегралом во вкладе от поперечного поля (от ФФ-пары). Произведенная замена вытекает из всего оказанного выше о ФФ-переворотах, поскольку после ФФ-переворота спин вращается снова в продольном поле, хотя и на другом узле, а не поперечном поле, как получается после введения $\Gamma_y(t_1)$ в кумулянтном уравнении. Другими словами, мы сейчас рассматриваем диаграммы, на которых содержится только одна линия поперечной проекции спина (хотя на ней при ФФ-переворотах меняется индекс узла) и произвольное количество z-линий (дуг), поэтому, если мы эту линию вынесли в (6.3I) в виде общего множителя $\Gamma_x(t)$ в правой части, то другим сомножителем может быть только $\Gamma_z(t)$. В кумулянтном выражении при допущении произведения $\Gamma_y(t_1)$ на $\Gamma_x(t)$ нарушается это важное правило, что неизбежно понижает точность его низшего приближения (4.3) в случае сильной анизотропии, так как $\Gamma_y(t_1)$ и $\Gamma_z(t_1)$ существенно различаются по скорости своего изменения. Наконец, в (6.33) изменение коэффициента перед интегралом по сравнению с (6.24) является следствием того, что вклад от ФФ-пар $\Delta_z^2\xi^2$ мы теперь внесли в уравнение (6.3I) для $\Gamma_{эф}(t)$.

Уравнение (6.33), в котором $\Gamma_{эф}(t)$ взято в виде

$$\Gamma_{эф}(t) = \prod_j \cos(\lambda J_{ij}^2 t) \qquad (6.34)$$

и с коэффициентом $[9/(4\lambda^2)-1]$ перед интегралом было предложено ранее в работах [II', I4'] для системы спинов с гамильтонианом усеченного дипольного взаимодействия на трехмерной кубической решетке. Произведение косинусов в (6.40) (исправлено от руки на 34) соответствует вращению спина в постоянном продольном локальном поле, усредненному по всем значениям поля. Параметр λ, связанный с учетом ФФ-переворотов, определяется в этих работах по разному. В работе [II'] приводится значение $\lambda \approx$ I,I9, тогда как в работе [I4'] $\lambda \approx (3/2)^{1/2} \approx$ 1,225. Для параметра λ из уравнения (6.3I) имеем

$$\lambda = (1 + \xi^2)^{1/2}, \qquad (6.35)$$

что приводит при $\xi = -1/2$ к меньшему значению $\lambda = \sqrt{5}/2 \approx$ I,I2. Наконец, отметим, что в работе [I4'] рассмотрен также вариант уравнения (6.33) с $\Gamma_{эф}(t)$ в виде (6.3I) с $\Gamma_z(t)$ в виде функции Гаусса.

Четвертый момент корреляционной функции $\mathcal{M}_x(t)$, определенный из системы уравнений (6.3I)-(6.33) совпадает со своим точным (в приближении СФП) значением (6.9), тогда как шестой момент оказывается больше своего точного значения (6.9) на величину

$$\Delta M_6 = 2\Delta_z^6 \xi^2 (1-\xi)^2 (1-\xi+\xi^2), \qquad (6.36)$$

составляющую 2% от точного значения M_6 в случае усеченного дипольного взаимодействия при $\xi = -1/2$. Близость моментов, также как и результаты численных расчетов [II', I4', I5'] указывают на большую эффективность выделения $\Gamma_{эф}(t)$ в качестве первого приближения для автокорреляционной функции по сравнению с выделением $\Gamma_\perp(t)$, выполненном выше в уравнениях (2.32), (6.I9).

В силу указанных причин представляется полезным вывести ана-

логичные (2.32), (6.19) уравнения, отличающиеся от последних заменой $\Gamma_{\perp}(t)$ на $\Gamma_{эф}(t)$. С этой целью возьмем в формулах Приложения Е в качестве функции $\Pi(t)$ функцию $\Gamma_{эф}(t)$, являющуюся решением уравнения (6.31). После чего из (Е.4) и (Е.6) имеем

$$\Gamma_{x}(t)=\Gamma_{эф}(t)-\int_0^t dt_1\,\Gamma_{эф}(t-t_1)\int_0^{t_1} dt_2\left[G_x(t_2)-Q_{эф}(t_2)\right]\Gamma_x(t_1-t_2)\,, \quad (6.37)$$

$$\Gamma_{x}(\vec{k},t)=\Gamma_{эф}(t)-\int_0^t dt_1\,\Gamma_{эф}(t-t_1)\int_0^{t_1} dt_2\left[\Sigma_x(\vec{k},t_2)-Q_{эф}(t_2)\right]\Gamma_x(\vec{k},t_1-t_2), \quad (6.38)$$

где $Q_{эф}(t)$ ядро интегрального уравнения

$$\frac{d}{dt}\Gamma_{эф}(t)=-\int_0^t Q_{эф}(t-t_1)\Gamma_{эф}(t_1)dt_1\,. \quad (6.39)$$

Для $\Gamma_{z}(t)$ сохраняется полное уравнение (2.17) (или его приближенный вариант (6.32)).

Поскольку уравнение для $\Gamma_{эф}(t)$ отличается от уравнения для $\Gamma_{\perp}(t)$ заменой Δ_z^2 на $X_2=\Delta_z^2(1+\xi^2)$, то $Q_{эф}(t)$ можно представить в виде суммы тех же самых неприводимых диаграмм, что и $Q(t)$ для функции $\Gamma_{\perp}(t)$, с соответствующей заменой коэффициентов перед диаграммами:

$$Q_{эф}(t)=(1+\xi^2)\,[\ldots]-(1+\xi^2)^2\,[\ldots]+\dots+(1+\xi^2)^m Q^{(2m)}(t)+\dots\,, \quad (6.40)$$

где тройной линией на диаграммах мы обозначаем $\Gamma_{эф}(t_\rho-t_{\rho+1})$.

Положим в уравнении (6.38) $\vec{k}=0$ и перепишем его в следующем виде:

$$\mathcal{M}_x(t)=\Gamma_{эф}(t)-\int_0^t \Phi(t-t_1)\mathcal{M}_x(t_1)dt_1\,, \quad (6.41)$$

где

$$\Phi(t)=\int_0^t \Gamma_{эф}(t-t_2)\left[\Sigma_x(0,t_2)-Q_{эф}(t_2)\right]dt_2\,. \quad (6.42)$$

В уравнении (6.33) эта функция взята в виде

$$\Phi_1(t)=\frac{-2\xi}{1+\xi^2}\frac{d}{dt}\Gamma_{эф}(t)=\frac{2\xi}{1+\xi^2}\int_0^t Q_{эф}(t-t_1)\Gamma_{эф}(t_1)dt_1 . \qquad (6.43)$$

В (6.43) использовано (6.39). Найдем разницу

$$\Delta\Phi(t)=\int_0^t \Gamma_{эф}(t-t_1)\{\Sigma_x(0,t_1)-Q_{эф}(t_1)(1-\xi)^2/(1+\xi^2)\}dt_1 . \qquad (6.44)$$

Перепишем теперь уравнение (6.4I), используя (6.44), в другом виде:

$$M_x(t)=\Gamma_{эф}(t)-\frac{2\xi}{1+\xi^2}\int_0^t \dot\Gamma_{эф}(t_1)M_x(t-t_1)dt_1 - \int_0^t \Delta\Phi(t_1)M_x(t-t_1)dt_1 . \qquad (6.45)$$

Полагая $\Delta\Phi(t)$ равным нулю, мы получаем приближенное уравнение (6.33). Тогда как $\Delta\Phi(t)$, определенное в (6.44), позволяет найти поправочные члены, поскольку уравнение (6.45) при сохранении полных рядов для $G_\alpha(t)$, $\Sigma_x(0,t)$ и $Q_{эф}(t)$ является точным.

В диаграммном ряду для выражения, стоящего в (6.44) в фигурных скобках, выпишем с учетом (6.6), (6.40) диаграммы с двумя и четырьмя вершинами:

$$(1-\xi)^2 \cdots - (1-\xi)^2 \cdots + \frac{(1-\xi)^2}{\xi^2} \cdots + (1-\xi)^2 \cdots - (1+\xi^2)(1-\xi)^2 \cdots . \qquad (6.46)$$

В явной записи для диаграмм в (6.46) сумма коэффициентов равна нулю, поэтому вклады от этих диаграмм в значительной степени компенсируются. В частности, временной ряд для (6.46) не содержит членов с t^0 и t^2, вследствие чего поправочный член в (6.45) не дает вклада в M_2, M_4.

В заключение настоящего параграфа определим вид решения систе-

мы уравнений (6.31)-(6.33) в окрестности особенности в точке $t = i\tau_{эф}$. Описанным в [I] способом (см. также [I5′]) находим

$$\Gamma_z(t) \approx \frac{2}{\Delta_z^2(1+\xi^2)(\tau_{эф}+it)^2},$$

$$\Gamma_{эф}(t) \approx \left[\frac{6}{\xi^2(1+\xi^2)}\right]^{1/2} \cdot \frac{1}{\Delta_z^2(\tau_{эф}+it)^2}, \tag{6.47}$$

$$M_x(t) \approx \left[\frac{6}{\xi^2(1+\xi^2)}\right]^{1/2} \cdot \frac{(1-\xi)^2}{(1+\xi^2)\Delta_z^2(\tau_{эф}+it)^2}.$$

Координату ближайшей особой точки $\tau_{эф}$ можно определить по уравнениям (6.3I) и (6.32) методом моментов (см. [I]). В частности, для $\xi = -1/2$, в работе [I5′] мы нашли для этих уравнений по моментам до 34-го порядка

$$\tau_{эф} \approx 1,199 \pm 0,001, \tag{6.48}$$

что несколько меньше значения I,24, найденного в [I] по полному десятому моменту.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В двух частях представленной работы были получены и исследованы уравнения, описывающие изменение во времени различных корреляционных функций в приближении СФП. Уравнения являются точными в пределе бесконечномерной решетки и бесконечной температуры. Наряду с этим были рассмотрены также более простые приближенные варианты уравнений, получающиеся из точных при сохранении только нескольких первых членов в рядах для функции памяти. Полученные уравнения могут быть использованы

для приближенного описания реальных трехмерных спиновых систем после подстановки в них соответствующих квадратов локальных полей. Для достижения большей точности в функцию памяти нужно добавить отброшенные в приближении СФП члены с петлями и многократными взаимодействиями между одними и теми же спинами. Таким путем можно будет включить поправки различной степени по $1/d$. Если рассматриваемая система конечной размерности имеет при этом большой радиус взаимодействия ($r_0 \gg 1$), то члены, ведущие к потере суммирования по решеточным индексам, по-прежнему пренебрежимы, но члены с петлями останутся. Важно обратить внимание, что не только при малых Z, но и при $Z \to \infty$ ряд для функции памяти содержит бесконечное число членов. Этот факт, в конечном счете, является следствием неперестановочности поворотов вокруг разных осей. Всякое укорочение этого ряда является дополнительным вынужденным приближением, которое не следует из предела $Z \to \infty$, вопреки утверждениям некоторых авторов. Укажем также на другое часто встречающееся заблуждение о том, что если $Z \to \infty$, то флуктуирующее во времени локальное поле становится гауссовским. Условия $Z \to \infty$ недостаточно, надо, чтобы $d \to \infty$.

Динамика реальных парамагнетиков будет, конечно, отличаться в деталях от динамики в идеализированном случае СФП, однако основные черты должны сохраниться. В пользу этого свидетельствует, в частности, неоднократное наблюдение экспоненциальных крыльев, выполненное методами магнитного резонанса в парамагнетиках с изотропным обменным [4-6] и анизотропным дипольным [7-13] взаимодействиями (более подробно эксперименты разобраны в [15,33]. Экспоненциальные высокочастотные асимптотики однозначно связаны с особенностями на оси мнимого времени, наличие которых в пределе СФП доказано в настоящей работе.

Приведем некоторые качественные соображения о зависимости формы спектра от радиуса взаимодействия r_0, размерности пространства d и числа ближайших соседей Z. В качестве примера выберем спектр $\Gamma_x(\vec{k},t)$ при $\vec{k}=0$ и $\xi \neq 1$. Если $Z=N$, т.е. все спины взаимодействуют между собой одинаковым образом, то решеточные суммы с петлями и без петель полностью совпадают, задача сводится [2'] к вращению в постоянном поле, направленном вдоль выделенной оси, и $M_x(t)$ имеет гауссову форму спектра со вторым моментом $\Delta_z^2(1-\xi)^2$. Если же радиус взаимодействия велик, но меньше размеров системы ($1 \ll r_0 \ll N^{1/d}$), то локальное поле на спине будет изменяться во времени. Вследствие этого гауссовы крылья заменятся на экспоненциальные и деформируется центральная часть спектра. В этом случае решеточные суммы с петлями и без них не совпадают, но, как показано в Приложении А, по величине они пропорциональны одинаковой степени большого числа Z. Включив этот большой множитель в масштабный множитель у времени и частоты (как это сделано в(I.4))получаем, что форма спектра не зависит от Z при $Z\to\infty$, а следовательно и от r_0. Форма спектра будет изменяться при изменении размерности пространства, поскольку при этом будет изменяться соотношение коэффициентов у различных решеточных сумм. По мере увеличения d будут возрастать отклонения спетра от гауссовой формы, вследствие относительного возрастания скорости изменения локального поля. При $d\to\infty$ суммами с петлями можно пренебречь, после чего спектр перестает зависеть от d и достигает предельной формы, рассмотренной в настоящей работе.

Автор признателен В.А.Ацаркину, Б.П.Провоторову, Ф.С.Джепарову, А.А.Лундину, Ю.Н.Иванову, М.М.Кучерову, М.А.Попову за полезные обсуждения результатов работы, а также Э.П.Зееру и О.В.Фалалееву за постоянное внимание и поддержку.

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Вычисление интегралов

Разберем нахождение главной части в окрестности ($t=\tau_\ell-\varepsilon_\ell$) особенности в точке $t=\tau_\ell$ интегралов следующего вида:

$$I_{mnk}^{(\ell)}=\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\,(\tau_\ell-t+t_2)^{-m}(\tau_\ell-t_1+t_2)^{-n}(\tau_\ell-t_1)^{-k}. \quad (C.1)$$

После замены переменной $x=\tau_\ell-t_1+t_2$, получаем

$$I_{mnk}^{(\ell)}\doteq\int_{\varepsilon_\ell}^{\tau_\ell}dx\,x^{-n}\int_0^{x-\varepsilon_\ell}dt_2\,(\varepsilon_\ell+t_2)^{-m}(x-t_2)^{-k}. \quad (C.2)$$

Выполнив в (C.2) интегрирование и сохранив только члены, имеющие максимальную степень малой величины $\varepsilon_\ell=\tau_\ell-t$ в знаменателе, находим

$$I_{121}^{(\ell)}=(2-\pi^2/6)\varepsilon_\ell^{-2}\approx 0{,}355\,\varepsilon_\ell^{-2},$$

$$I_{211}^{(\ell)}=I_{112}^{(\ell)}=(\pi^2/6-1)\varepsilon_\ell^{-2}\approx 0{,}645\,\varepsilon_\ell^{-2},$$

$$I_{122}^{(\ell)}=I_{221}^{(\ell)}=(7/2-\pi^2/3)\varepsilon_\ell^{-3}\approx 0{,}210\,\varepsilon_\ell^{-3}, \quad (C.3)$$

$$I_{222}^{(\ell)}=(10-\pi^2)\,\varepsilon_\ell^{-4}\approx 0{,}130\,\varepsilon_\ell^{-4},$$

$$I_{202}^{(\ell)}=\varepsilon_\ell^{-2}.$$

Рассмотрим интегралы в (5.46) в окрестности особенности в точке $i\tau_o$. После подстановки $\Gamma(t)$ в виде (4.15) и перехода к мнимому времени, получаем для первого слагаемого в (5.46) интеграл

$$И_1=\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\,(\tau_o-t_1)^{-2}(\tau_o-t+t_2)^{-2}=I_{202}^{(o)}\approx\varepsilon_o^{-2} \quad (C.4)$$

Подынтегральное выражение в (С.4) расходится при $t_2 \to 0$ и $t_1 \to t$, поэтому вычисляем интеграл по t_2 и оставляем значение первообразной при $t_2 = 0$, а затем выполняем интегрирование по t_1.

Во втором члене в (5.46) тем же путем получаем интеграл

$$И_2 = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_4 \int_{t_4}^{t_1} dt_2 \int_{t_4}^{t_1} dt_3 \, (\tau_0 - t + t_2)^{-2} (\tau_0 - t_3)^{-2} (\tau_0 - t_1 + t_4)^{-2} \approx I_{121}^{(0)} . \quad (C.5)$$

В (С.5) выполняем сначала интегрирование по t_2 и t_3. Оставив затем значение первообразной при $t_3 = t_1$ в первом и $t_2 = t_4$ во втором случае, получаем, что $И_2 \approx I_{121}^{(0)}$.

Наконец, найдем расходящуюся часть интеграла $(И_3)$ для третьего члена в (5.47). Интеграл будет расходиться при t_2, t_4 и t_6, стремящихся к нулю, а t_1, t_3, t_5, стремящихся к t. Поэтому, при интегрировании по t_2 и t_5 оставим значения первообразной при $t_3 = t_1$ и $t_2 = t_4$. После чего, выполнив интегрирование по t_1 и t_5, сведем интеграл к сумме четырех, рассчитанных в (С.3),

$$И_3 \approx I_{202}^{(0)} + I_{121}^{(0)} - 2 I_{211}^{(0)} \approx (5 - \pi^2/2)\,\varepsilon_0^{-2} \approx 0{,}065\,\varepsilon_0^{-2} \quad (C.6)$$

Интеграл в (5.65) (обозначим его $И_A$) распадается на три интеграла (С.3) следующим образом

$$И_A = I_{121}^{(A)} + \varepsilon_A^2 I_{222}^{(A)} - 2\varepsilon_A I_{122}^{(A)} = (5 - \pi^2/2)\,\varepsilon_A^{-2} . \quad (C.7)$$

Здесь $\varepsilon_A = (\tau_A - t)$.

ПРИЛОЖЕНИЕ Д

Корреляционная функция $\Gamma_x(\vec{k},t)$ в приближении ФФ-переворотов в постоянных локальных полях

Рассомотрим аксиальный случай $\Delta_x^2=\Delta_y^2$ с сильной анизоропией $\Delta_z^2 \gg \Delta_x^2$ ($\xi^2 \ll 1$). Начнем с автокорреляционной функции $\Gamma_x(t)$ (I.6). Возьмем в ряду (2.II) для нее члены без ФФ-переворотов, сумму которых мы обозначаем на диаграммах двойной линией:

$$= \text{———} - \text{(диаграмма)} + \text{(диаграмма)} - \dots \quad (Д.I)$$

Стрелками на диаграммах обозначаем h^z вершины, поскольку при их перестановках между собой не меняется коэффициент перед диаграммой. Вклад в этот коэффициент от каждой дуги равен Δ_z^2. В силу постоянства поля ($\Gamma_z(t)=1$) нет также зависимости от временного интервала между вершинами на концах дуги. Вычислив интеграл по положению каждой вершины на оси времени в пределах от 0 до t, получаем результат t^{2n} для члена в ряду (Д.I) с $2n$ вершинами. Этот результат следует поделить на $2^n n!$, так как при таком интегрировании мы каждую диаграмму с определенной схемой спаривания учли не один, а $2^n n!$ раз (2^n из-за того, что мы переставляли местами правую и левую вершину у каждой дуги, $n!$ из-за перестановки дуг). Собрав все множители получаем ряд по степеням времени, являющийся рядом для функции Гаусса:

$$\Gamma_1(t)=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{t^{2n}\Delta_z^{2n}}{2^n n!}=\exp\left(-\frac{\Delta_z^2 t^2}{2}\right). \quad (Д.2)$$

Теперь выпишем члены ряда (2.II) для $\Gamma_x(t)$, содержащие одну ФФ-пару и произвольное число дуг с разделенными этой ФФ-парой вершинами h_i^z на диаграммах:

$$- \underset{i \quad j \quad i}{\frown} + \underset{t \quad t_1 \quad t_2 \quad 0}{\frown} - \underset{i \quad j \quad i}{\frown} + \ldots \quad (Д.3)$$

Обозначения на диаграммах те же, что и в основном тексте, по индексам узла j выполняется суммирование. Интегрирование по временным переменным, соответствующим концам дуг со стрелками, выполняем в пределах от 0 до t_2 для вершин справа от ФФ-пары и от t_1 до t слева (для каждой вершины независимо от других). Поскольку $\Gamma_z(t)=1$, интегралы легко вычисляются и мы получаем для члена в (Д.3) с n такими дугами результат интегрирования $t_2^n(t-t_1)^n$. Однако при таком интегрировании мы каждую диаграмму с определенной схемой спаризания вершин h_i^z, учли не один, а $n!$ раз, поэтому результат интегрирования следует поделить на $n!$. Собрав все коэффициенты, получаем ряд по степеням времени

$$-\xi^2\Delta_z^2 \sum_{n=0}^{\infty} \Delta_z^{2n}(-1)^n t_2^n (t-t_1)^n/n! = -\xi^2\Delta_z^2 \exp\{-t_2(t-t_1)\Delta_z^2\}. \quad (Д.4)$$

Наконец, домножив (Д.4) на три множителя $\Gamma_\perp(t_p-t_{p+1})$ для трех отрезков, на которые вершины ФФ-пары разбивают временную ось, получаем окончательный результат для $\Gamma_x^{(1)}(t)$, суммы ряда (Д.3).

$$\Gamma_x^{(1)}(t) = -\xi^2\Delta_z^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2\, \Gamma_\perp(t-t_1+t_2)\Gamma_\perp(t_1-t_2) = \quad (Д.5)$$

$$= -\xi^2\Delta_z^2 \int_0^t \Gamma_\perp(t-\theta)\Gamma_\perp(\theta)(t-\theta)d\theta .$$

Результат (Д.5) можно было предугадать заранее, поскольку при $\Gamma_z(t)=1$ результат должен зависеть только от суммарного времени нахождения поперечной компоненты спина на исходном узле i. Другими словами, результат одевания линии поперечной компоненты спина i вершинами h_i^z на диаграмме зависит от ее суммарной протяженности во времени, а не от способа разделения этой величины на части. Используя сформулированное свойство легко получить резуль-

тат для одетой дугами с разделенными вершинами h_i^z диаграммы с n ФФ-парами, вставленными в линию спина i,

$$\Gamma_x^{(n)}(t) = (-1)^n \xi^{2n} \Delta_z^{2n} \int_0^t d\theta\, \Gamma_\perp(t-\theta)(t-\theta)^n/n! \times$$
$$\times \int_0^{\theta} d\theta_1 \int_0^{\theta-\theta_1} d\theta_2 \ldots \int_0^{\theta-\theta_1-\ldots\theta_{n-2}} d\theta_{n-1}\, \Gamma_\perp(\theta_1)\Gamma_\perp(\theta_2)\ldots\Gamma_\perp(\theta-\theta_1-\theta_2-\ldots\theta_{n-1}), \quad (Д.6)$$

где $\theta_p = t_{2p-1} - t_{2p}$ длина временного интервала между вершинами pй ФФ-пары, $\theta = \sum_{p=1}^{n} \theta_p$ – суммарная длина участка на временной оси, недоступного для h_i^z вершин. Если теперь сложить все такие члены (Д.6) с различным числом ФФ-пар, то мы получим для автокорреляционной функции $\Gamma_x(t)$ в рассматриваемом сейчас приближении выражение в виде ряда

$$\Gamma_x(t) = \Gamma_\perp(t) + \sum_{n=1}^{\infty} \Gamma_x^{(n)}(t) \quad . \qquad (Д.7)$$

Ряд в (Д.7) легко суммируется после преобразования Лапласа, поскольку его члены (Д.6) имеют вид свертки, и мы получаем

$$\Gamma_x(s) = \sum_{n=0}^{\infty} \xi^{2n} \Delta_z^{2n} \frac{1}{n!} \left[\Gamma_\perp(s)\right]^n \frac{d^n}{ds^n} \Gamma_\perp(s) = \Gamma_\perp\left(s + \xi^2 \Delta_z^2 \Gamma_\perp(s)\right), \quad (Д.8)$$

где $\Gamma_x(s)$ и $\Gamma_\perp(s)$ образы Лапласа от $\Gamma_x(t)$, $\Gamma_\perp(t)$, s – параметр преобразования.

Вернемся к диаграммам (Д.3). На интервале (t_2, t_1) вращение спина j происходит независимо от вращения спина i, поэтому для спина j мы можем учесть его ФФ-перевороты в поле $h_j^{x,y}$ (ФФ-пары), как это было сделано ранее для самого спина i. Такое одевание ФФ-парами линий всех спинов j, q, ... на интервалах θ_1, $\theta_2, \ldots, \theta_n$ на диаграмме с n ФФ-парами исходного спина приводит к замене $\Gamma_\perp(\theta_p)$ в произведении этих функций в (Д.6) на искомую автокорреляционную функцию $\Gamma_x(\theta_p)$. После чего мы получаем вместо (Д.8) самосогласованное уравнение для $\Gamma_x(s)$:

$$\Gamma_{\perp}'(s) = \Gamma_{\perp}\left(s + \xi^2 \Delta_z^2 \Gamma_x(s)\right) . \qquad (Д.9)$$

Перейдем теперь к перекрестной корреляционной функции $\Gamma_x'(\vec{k},t)$ (5.27). Возьмем первые две диаграммы (5.42) ряда для нее, содержащие по одному ФФ-перевороту,

t_1 , t_1 . (Д.10)

Линии поперечных компонент спинов слева и справа от поперечной вершины в момент времени t_1 относятся к различным узлам (спинам), и поэтому мы их можем одеть независимо друг от друга ФФ-парами описанным выше путем. На интервале со стрелкой содержится одна дополнительная вершина h^z , по которой следует выполнить интегрирование. При наличии n ФФ-пар на этом интервале мы из области интегрирования для этой вершины должны выкинуть суммарную длительность θ участков внутри ФФ-пар, на которых не может оканчиться дуга со стрелкой на диаграмме (Д.10). В силу указанных причин для члена с n ФФ-парами на участке со стрелкой подынтегральное выражение в (Д.6) домножится на $(t-\theta)$. Суммируя после преобразования Лапласа полученные ряды по числу ФФ-пар, находим как для первой, так и для второй диаграммы в (Д.10)

$$\Gamma_x^{(1)}(\vec{k},s) = -E_{\vec{k}}\, \Gamma_x(s) \frac{d}{d\Omega(s)} \Gamma_{\perp}(\Omega(s)) , \qquad (Д.11)$$

где $\Omega(s) = s + \xi^2 \Delta_z^2 \Gamma_x(s)$.

Рассмотрим теперь в ряду $\Gamma_x'(\vec{k},t)$ диаграмму с двумя ФФ-переворотами следующего вида:

$t \quad t_1 \quad t_2 \quad 0$. (Д.12)

Поскольку в этот раз на интервале (t_2, t_1) оканчиваются две внешние для него дуги, то при одевании поперечной компоненты спина на

этом интервале ФФ-парами подынтегральное выражение в формуле (Д.6) следует домножить уже на $(t-\theta)^2$. Суммируя ряды по числу ФФ-пар после преобразования Лапласа, получаем

$$\Gamma_x^{(2)}(\vec{k},s)=\left[\Gamma_x(s)\right]^2 E_{\vec{k}}^2 \frac{d^2}{d\Omega^2(s)}\Gamma_\perp(\Omega(s)) . \quad (Д.13)$$

Все диаграммы для $\Gamma_x(\vec{k},s)$ (образа Лапласа от полной корреляционной функции $\Gamma_x(\vec{k},t)$ (6.I)), построенные из произвольного числа последовательно расположенных фрагментов (Д.I), (Д.3), (Д.I0) и (Д.I2), можно получить, взяв матричный элемент $V_{12}(s)$ матричного ряда

$$\hat{V}(s)=\hat{E}+\hat{u}(s)+\left[\hat{u}(s)\right]^2+\ldots , \quad (Д.I4)$$

где $\hat{E}$ единичная матрица, $\hat{u}(s)$ матрица 2x2, элементы которой, полученные на основании формул (Д.II), (Д.I3), приведены в (6.30), $u_{12}(s)=\Gamma_x(s)$. Просуммировав геометрическую прогрессию в (Д.I4), находим

$$\Gamma_x(\vec{k},s)=\left\{\left[\hat{E}-\hat{u}(s)\right]^{-1}\right\}_{12} . \quad (Д.I5)$$

и далее после вычисления обратной матрицы окончательный результат (6.29).

ПРИЛОЖЕНИЕ Е

Преобразование интегральных уравнений для корреляционных функций

Возьмем функцию $\Pi(t)$ $(\Pi(0)=1)$ удовлетворяющую уравнению

$$\frac{d}{dt}\Pi(t)=-\int_0^t Q_n(t-t_1)\Pi(t_1)dt_1 . \quad (Е.I)$$

Выполнив преобразование Лапласа над этим уравнением и уравнением (2.I7) для $\Gamma_x(t)$, получаем систему алгебраических уравнений

$$s\tilde{\Pi}(s) = 1 - \tilde{Q}_{\Pi}(s)\tilde{\Pi}(s) ,$$
$$s\tilde{\Gamma}_x(s) = 1 - \tilde{G}_x(s)\tilde{\Gamma}_x(s) , \quad (E.2)$$

где s - параметр преобразования Лапласа, во лой сверху отмечены образы соответствующих функций. Поделив одно уравнение на другое, находим после преобразований

$$\tilde{\Gamma}_x(s) = \tilde{\Pi}(s) - \tilde{\Pi}(s)\left[\tilde{G}_x(s) - \tilde{Q}_{\Pi}(s)\right]\tilde{\Gamma}_x(s) . \quad (E.3)$$

Вернувшись в (Е.3) к первоначальным функциям времени, получаем уравнение

$$\Gamma_x(t) = \Pi(t) - \int_0^t dt_1\, \Pi(t-t_1) \int_0^{t_1} dt_2 \left[G_x(t_2) - Q_{\Pi}(t_2)\right]\Gamma_x(t_1-t_2) . \quad (E.4)$$

Аналогичное преобразование уравнения (5.28) для функции с нулевым начальным значением $\Gamma_x'(\vec{k},t)$ дает

$$\Gamma_x'(\vec{k},t) = +\int_0^t dt_1\, \Pi(t-t_1) \int_0^{t_1} dt_2\, G_x(\vec{k},t_2)\Gamma_x(t_1-t_2) - \quad (E.5)$$
$$- \int_0^t dt_1\, \Pi(t-t_1) \int_0^{t_1} dt_2 \left[\Sigma_x(\vec{k},t_2) - Q_{\Pi}(t_2)\right]\Gamma_x'(\vec{k},t_1-t_2) .$$

Сложив (Е.4) и (Е.5) получаем окончательное уравнение для полной корреляционной функции

$$\Gamma_x(\vec{k},t) = \Pi(t) - \int_0^t dt_1\, \Pi(t-t_1) \int_0^{t_1} dt_2 \left[\Sigma_x(\vec{k},t_2) - Q_{\Pi}(t_2)\right]\Gamma_x(\vec{k},t_1-t_2) . \quad (E.6)$$

С помощью выбора функции $\Pi(t)$ или $Q_{\Pi}(t)$ мы можем изменять вид уравнений (Е.4)-(Е.6) по своему желанию. Например, можем взять $\Pi(t) = \Gamma_I(t)$ и получить уравнения (2.32),(6.19) с $R_x(t) = G_x(t) - Q(t)$ в полном согласии с (2.33). Можем взять $Q_{\Pi}(t) = G_x(t)$, т.е. $\Pi(t) = \Gamma_x(t)$, тогда под интегралом останется только $G_x(\vec{k},t)$ - ядро уравнения для перекрестной корреляционной функции. Наконец, функцию $Q_{\Pi}(t)$ можно задать в виде суммы вкладов от неприводимых

диаграмм, содержащихся в $G_x(t)$, но взятых с другими коэффициентами, а затем добиваться желаемого вида уравнений подбором этих коэффициентов.

1. Зобов В.Е. Динамика анизотропного гейзенберговского парамагнетика в приближении самосогласованного флуктуирующего поля. I. Автокорреляционные функции. - Препринт № 514 Ф. Красноярск: ИФ СО АН СССР. - 1988. - 55 с.
2. Колоколов И.В. //ЖЭТФ. - 1986.- т.91. № 6. - с.2313-2318.
3. Gill J.C. // J.Phys.C.- 1971.- V.4, N11,-P.1420-1425.
4. Walstedt R.E. // Phys.Rev.B.-1972.-V.5,N9,-P.3782-3787.
5. Landesman A. // Ann.Phys.(Fr.)-1973.-V.8, N1,-P.53-79.
6. Cusumano C., Troup G. // Phys.Stat.Sol.(b).-1974.- V.65, N2,-P.655-663.
7. McArthur D.A., Hahn E.L., Walstedt R.E. // Phys.Rev. - 1969.- V.188, N2, P.609-638.
8. Булгаков М.И., Гулько А.Д., Ратовский Ю.А., Тростин С.С. //ЖЭТФ,-1971,- т.61, № 2.- с.667-677.
9. Stokes H.T., Ailion D.C. // Phys.Rev.B.-1977.-V.15,N3,P.1271.
10. Garroway A.N. // J.Magn.Reson.-1979.- V.34, N2,-P.283-293.
11. Сафин В.А., Скребнев В.А., Винокуров В.М. //ЖЭТФ,-1984,- т.87, № 6,- с.1889-1893.
12. Ацаркин В.А., Ва   ева Г.А., Демидов В.В. //ЖЭТФ. - 1986. т.91, № 4, - с.1523-1535.
13. Markert J.T., Cotts R.M. // Phys.Rev.B.- 1987.- V.36, N13.- P.6993-7002.

Ответственный за выпуск В.Е.Зобов
Подписано в печать 5.10.88 АЛ 04485
Уч.изд.л. 2,3, Тираж 200, Заказ №490
Отпечатано на ротапринте ИФ СО АН СССР
660036, Красноярск, Академгородок.